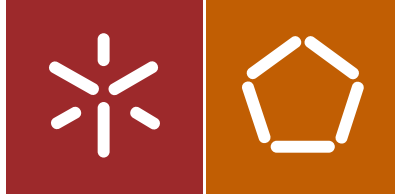


Universidade do Minho  
Escola de Engenharia

António Pedro Varela da Cruz

Simulação térmica e elétrica dos módulos  
termoelétricos e a sua respetiva otimização





Universidade do Minho  
Escola de Engenharia

António Pedro Varela da Cruz

Simulação térmica e elétrica dos módulos  
termoelétricos e a sua respetiva otimização

Dissertação de Mestrado  
Ciclo de Estudos Integrados Conducentes ao  
Grau de Mestre em Engenharia Mecânica

Trabalho efetuado sob a orientação do  
Professor Doutor Luís Valente Gonçalves  
Professor Doutor Francisco C.P de Brito

## Declaração

António Pedro Varela da Cruz

Endereço eletrónico: a58839@alunos.uminho.pt

Telefone:914263583

Número do cartão cidadão:

Título da dissertação:

**Simulação térmica e elétrica dos módulos termoeletrônicos e a sua respetiva otimização**

Orientador:

Doutor Luís Miguel Valente Gonçalves

Coorientador:

Doutor Francisco C. Pimenta de Brito

Ano de conclusão: 2014

Tese submetida na Universidade do Minho para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica

É AUTORIZADA A REPRODUÇÃO INTEGRAL DESTA TESE/TRABALHO APENAS PARA EFEITOS DE INVESTIGAÇÃO, MEDIANTE DECLARAÇÃO ESCRITA DO INTERESSADO, QUE A TAL SE COMPROMETE;

Universidade do Minho, \_\_/\_\_/

**Assinatura:**

## AGRADECIMENTOS

O desenvolvimento desta dissertação e todo o meu percurso académico foi influenciado por um conjunto de pessoas. Quero expressar os meus sinceros agradecimentos pelo apoio destes nesta fase da minha vida.

Agradeço, em primeiro lugar, todo o apoio e disponibilidade prestados pelos meus orientadores neste projeto, Doutor Luís Gonçalves e Doutor Francisco Brito. Um muito obrigado para o Doutor Jorge Martins pelos conselhos teórico-práticos e por todo o acompanhamento ao longo desta etapa. A transmissão de conhecimentos e os conselhos dados por todos estes professores, contribuíram para o meu enriquecimento técnico e pessoal e fizeram com que a realização desta dissertação fosse possível.

Ao Armando Alves e ao Luís figueiredo, agradeço a partilha de conhecimentos a nível da Eletrónica, imprescindível para o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço a todos os meus amigos e colegas de curso, pela camaradagem e amizade com que pude contar nestes últimos cinco anos: David Lopes, Renato Viana, Diogo Couto e João Fernando Oliveira.

Quero agradecer a todos os meus amigos, que me acompanham desde o ensino secundário, por todos os bons momentos, em particular: André Dias, Ricardo Ribeiro, João Barbosa, Ivo Lopes, André Costa, Hugo Neves e Francisco Bnoun.

À minha namorada, Maria Pires, agradeço por me compreender e apoiar incondicionalmente. Ainda, por toda a motivação transmitida, essencial para enfrentar qualquer dificuldade. Muito obrigado pelo companheirismo!

Por último, agradeço aos meus pais pela confiança e estímulo ao longo de toda a minha formação. Foram eles que acompanharam todo o meu percurso e fizeram com que eu chegasse até aqui. Sem eles nada disto era possível. Por esta razão, dedico-lhes esta dissertação. Muito obrigado!



## RESUMO

A preocupação ambiental hoje em dia é cada vez maior, principalmente, quando se trata da tarefa de assegurar a sustentabilidade ambiental e dos recursos naturais, de reduzir a poluição atmosférica urbana e as emissões de gases de efeito de estufa. Isto levou à necessidade de diminuir o consumo e a dependência do uso de combustíveis fósseis. É sabido que os motores de combustão interna são dos principais responsáveis pelo consumo destes recursos e pelas emissões a eles associadas. Isto promoveu nas últimas décadas a criação de normas e regulamentos internacionais que intimam os fabricantes de automóveis a cortarem drasticamente as suas emissões por quilómetro.

Estas restrições têm levado os fabricantes a tomar inúmeras medidas para aumentar a eficiência energética dos seus veículos. Uma das formas de o fazer, e onde o presente trabalho incide, passa pela recuperação de parte da entalpia contida nos gases de escape, que é da mesma ordem de grandeza do trabalho mecânico produzido pelo motor. Isto pode ser conseguido por diversos métodos, nomeadamente através do uso de dispositivos que convertem diretamente a energia térmica em eletricidade, como os módulos termoeletrônicos. Estes dispositivos permitem a geração de energia elétrica a partir da existência de um diferencial de temperatura através das suas faces.

Porém, um dos problemas dos módulos termoeletrônicos é a sua baixa eficiência energética. Para além disso, os materiais termoeletrônicos (pares de materiais semicondutores que permitem a conversão da energia térmica em energia elétrica através do efeito Seebeck) são geralmente caros. Recentes investigações concluíram que a geometria dos módulos em si tem um papel muito importante no seu funcionamento e desempenho. Nomeadamente, é possível aumentar a densidade de potência e reduzir substancialmente o uso de terras raras se se associarem métodos eficientes de transferência de calor com o uso de módulos de baixo perfil.

Tendo em conta os aspetos acima expostos, que são o contexto fundamental desta dissertação, são propostos vários métodos de cálculo, com diferentes graus de complexidade e esforço de computação, para a determinação dos parâmetros de desempenho dos módulos termoeletrônicos com vista à sua otimização. Esta otimização passa pela análise das principais variáveis que afetam a potência elétrica gerada, como a espessura do material termoeletrônico e do substrato cerâmico, as resistências de contacto térmicas e elétricas. Conseguiu-se uma boa

complementaridade entre os métodos mais simplificados, baseados em abordagens térmicas 1D e bastante expeditos para cálculos em massa, e os métodos mais realistas e exigentes computacionalmente, baseados em ferramentas comerciais do tipo *multiphysics*. Concluiu-se que efetivamente é possível otimizar a geometria dos atuais módulos termoeletrônicos de forma a aumentar a sua potência máxima e reduzir o seu custo, especialmente se for possível minimizar as resistências térmicas e elétricas de contacto

**Palavras-Chave:** Módulos termoeletrônicos, modelação de TEG, geometria do módulo, resistências de contacto, potência elétrica máxima



## ABSTRACT

Environmental concerns are increasing nowadays. This is especially true when it comes to the task of ensuring environmental and resources sustainability, of reducing urban atmospheric pollution and Greenhouse Gases emissions. This has led to the need of reducing the consumption and dependency on fossil fuels. It is widely known that internal combustion engines are among the major contributors for the depletion of these resources and for their associated emissions. This fact has spurred the issuing of international standards and regulations enforcing automakers to drastically reduce their emissions per km.

These restrictions have led manufacturers to take many measures that increase the energy efficiency of their vehicles. One way of achieving it, which is the focus of the present work, involves the recovery of part of the enthalpy contained in exhaust gases. This enthalpy is of the same order of magnitude of the mechanical work provided by the engine. This recovery may be accomplished by various methods, namely through the use of devices that directly convert thermal energy into electricity, such as thermoelectric modules. These devices allow the generation of electrical energy from the an existing temperature differential across their faces.

Nevertheless, one of the problems of thermoelectric modules is its low energy efficiency. In addition, the thermoelectric materials (pairs of semiconductors that allow the conversion of thermal energy into electrical energy through Seebeck effect) are generally expensive. Recent investigations have concluded that the geometry of the modules itself has a very important role in its operation and performance. Namely, it is possible to increase power density and reduce substantially the use of rare earths if effective heat transfer methods are associated with low profile modules.

Considering the aforementioned aspects, which constitute the fundamental context of this dissertation, several calculating methods, with various complexity degree and computation intensiveness, have been proposed for determining the performance parameters of thermoelectric modules aiming at their optimization. This optimization encompasses the analysis of the main variables affecting the electric power generated, such as the thickness of both the thermoelectric materials and the ceramic substrate, the thermal and electrical contact resistances. A good complementarity has been achieved between straightforward 1D thermal approaches which are suited for quick mass calculations and more realistic and computational

intensive methods based on multiphysics-based commercial packages. It was concluded that it is possible to optimize the geometry of existing modules so that an increase of the generated power and a reduction of their cost is achieved, especially if thermal and electric contact resistances may be minimized.

**Keywords:** thermoelectric modules, TEG modelling, module geometry, contact resistance, electric power maximization

# ÍNDICE

Agradecimentos.....	I
Resumo .....	iii
Abstract .....	v
Lista de Figuras.....	ix
Lista de Tabelas.....	xiii
Lista de Acrónimos.....	xv
Lista de Variáveis .....	xvi
<b>1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>2</b>
1.1 Enquadramento Geral .....	2
1.2 Objetivos e motivações.....	3
1.3 Organização e estruturação da dissertação.....	4
<b>2 CONCEITOS TEÓRICOS E ESTADO DA ARTE.....</b>	<b>8</b>
2.1 Introdução .....	8
2.2 Termoeletricidade.....	8
2.2.1 Efeito de <i>Seebeck</i> .....	8
2.2.2 Efeito de <i>Peltier</i> .....	12
2.2.3 Efeito Thomson .....	13
2.2.4 Efeito <i>Joule</i> .....	14
2.2.5 Classificação dos Materiais .....	15
2.3 Transferência de calor.....	15
2.4 Introdução ao estado da arte .....	18
2.4.1 Módulos termoeletrônicos.....	18
2.4.2 Materiais termoeletrônicos .....	20
2.4.3 Otimização da geometria dos módulos.....	21
<b>3 MODELAÇÃO E SIMULAÇÃO.....</b>	<b>32</b>
3.1 Introdução .....	32
3.2 Modelo térmico.....	32
3.2.1 Transferência de calor a 1D resolvido com circuito elétrico equivalente.....	32
3.2.2 Transferência de calor a 1D usando <i>Shape factors</i> .....	37
3.2.3 Modelação térmica detalhada no <i>ANSYS CFX</i> .....	40
3.3 Modelo elétrico .....	43
3.3.1 Modelação térmica e elétrica em <i>MATLAB</i> .....	47

3.3.2	Análise termoeletrica através do <i>ANSYS Thermal-electric</i> .....	48
<b>4</b>	<b>CARACTERIZAÇÃO DOS MÓDULOS E OS SEUS PARAMETROS DE ENTRADA.....</b>	<b>52</b>
4.1	Introdução .....	52
4.2	Caraterização dos módulos .....	52
4.3	Parâmetros standard dos módulos termoeletrônicos.....	54
4.4	Parâmetros de entrada nas simulações .....	57
<b>5</b>	<b>ANÁLISE E DISCUSSÃO DE RESULTADOS .....</b>	<b>60</b>
5.1	Introdução .....	60
5.2	Análise térmica e elétrica do módulo.....	60
5.3	Comparação dos métodos de cálculo .....	69
5.3.1	Diferença de temperatura às faces do telureto de bismuto .....	69
5.3.2	Potência térmica.....	73
5.3.3	Potência elétrica .....	78
5.4	Análise térmica e elétrica dos parâmetros de saída no modelo do <i>MATLAB</i> com a inclusão dos permutadores de calor .....	82
5.5	Análise dos comportamentos térmicos e elétricos dos módulos termoeletrônicos nas simulações numéricas.....	85
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES E TRABALHO FUTURO.....</b>	<b>90</b>
	<b>REFRÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>93</b>
	Anexo I – Metodologia para a calcular o fluxo de calor no <i>ANSYS CFX</i> (determinação de shape factors).98	
	Anexo II – Metodologia para realização de uma simulação no <i>ANSYS CFX</i> de uma célula termoeletrica. .....	104
	Anexo III – Metodologia para realização de uma simulação no <i>ANSYS TE</i> de uma Junção termoeletrica. .....	113
	Anexo IV – Artigo submetido pelo grupo de trabalho ao <i>Journal of Electronic Materials</i> .....	119
	Apêndice – Artigo submetido pelo grupo de trabalho com referência especial ao <i>MATLAB</i> .....	146

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Movimento dos elétrons de uma junção quando os materiais são submetidas a uma diferença de temperatura gerando um potencial elétrico [7].....	9
Figura 2.2 – Princípio de funcionamento de um termopar [7]. ....	10
Figura 2.3 – Junção PN de um módulo termoeletrônico [9]. ....	11
Figura 2.4 – Esquema geral de um módulo termoeletrônico [10].....	11
Figura 2.5 – Modos de operação do efeito <i>Peltier</i> [4] .....	12
Figura 2.6 – Demonstração do efeito de <i>Thomson</i> [4]. ....	13
Figura 2.7 – Efeito <i>Joule</i> que ocorre ao longo de uma Junção [4]. ....	14
Figura 2.8 – As diversas formas de transferência de calor [14]. ....	16
Figura 2.9 - Potência máxima versus número de módulos no sistema para três ratio de capacidades caloríficas diferentes onde (A) rácio=10, (B) rácio=3, e (C) rácio=1. [18].....	19
Figura 2.10- Figura de mérito de diversos materiais termoeletrônicos comuns no mercado [20] [11]. ....	20
Figura 2.11 - Resultados da simulação: impacto da resistência elétrica de contacto nos valores de ZT do módulo para diferentes espessuras de material TE [26]. ....	22
Figura 2.12 – Resultados da simulação: valores de ZT do módulo versus valores de temperatura da parte fria para diferentes espessuras de material TE [26]. ....	22
Figura 2.13 – Impacto da resistência de contacto na figura de mérito dos módulos para diferentes espessuras de Material TE: comparação entre os resultados experimentais (triângulos, quadrados e círculos) com resultados numéricos, com (linha grossa) e sem (linha fina) os efeitos de radiação e convecção. A variação do tipo de linha refere-se a diferentes espessuras de material TE [26]. ....	23
Figura 2.14 – Esquema do modelo numérico de uma junção [27]. ....	24
Figura 2.15 – Resultados experimentais e numéricos para potência elétrica em função da diferença da temperatura no material TE nos módulos da 1ª geração [27]. ....	25
Figura 2.16 - Resultados experimentais e numéricos para potência elétrica em função da diferença da temperatura no material TE nos módulos da 2ª geração [27]. ....	25
Figura 2.17 - Os efeitos da resistência de carga na potência elétrica por unidade de área do módulo termoeletrônico [27]. ....	26
Figura 2.18 – Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE sem resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 300 K [27]. ....	27
Figura 2.19 - Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE sem resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 400 K [27]. ....	27
Figura 2.20 - Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE sem resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 500 K [27]. ....	27
Figura 2.21 – Resumo dos resultados das três figuras anteriores [27]. ....	27

Figura 2.22 - Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE com resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 300 K [27].	28
Figura 2.23 - Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE com resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 400 K [27].	28
Figura 2.24 - Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE com resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 500 K [27].	28
Figura 2.25 - Resumo dos resultados das três figuras anteriores [27].	28
Figura 2.26 – Potência máxima elétrica por unidade de área versus resistência de contacto do módulo para diversas frações de ocupação [27].	29
Figura 3.1 - Esboço da célula de um módulo termoeletrônico considerado no modelo térmico a 1D com diferentes caminhos por onde o fluxo de calor passa (Vista de frente e abaixo a vista de cima).	33
Figura 3.2 – Circuito térmico equivalente do modelo.	34
Figura 3.3 – Parte da folhe de cálculo Excel que demonstra o processo de iteração usado neste método.	36
Figura 3.4 – Ilustração dos efeitos 3D da transferência de calor através do substrato de Alumina (vista da frente).	37
Figura 3.5 - Ilustração dos efeitos 3D da transferência de calor através do substrato de Alumina (vista da direita).	37
Figura 3.6 – Geometria do substrato de alumina desenhado no <i>SolidWorks</i> . Evidenciado a fronteira da interface com o cobre.	38
Figura 3.7 - Geometria do metal condutor (cobre) desenhado no <i>SolidWorks</i> . Evidenciado a fronteira da interface com o material termoeletrônico.	38
Figura 3.8 - Geometria de alumina usado para calcular o shape factor, com o contorno do comportamento do fluxo de calor na interface da face quente ( <i>ANSYS CFX</i> ).	39
Figura 3.9 - Geometria de alumina usado para calcular o shape factor, com o contorno do comportamento do fluxo de calor na interface da face fria ( <i>ANSYS CFX</i> ).	39
Figura 3.10 - Geometria do cobre usado para calcular o shape factor, com o contorno do comportamento do fluxo de calor na interface da face quente ( <i>ANSYS CFX</i> ).	39
Figura 3.11 - Geometria de cobre usado para calcular o shape factor, com o contorno do comportamento do fluxo de calor na interface da face fria ( <i>ANSYS CFX</i> ).	39
Figura 3.12 – Malha criada para as simulações realizadas no <i>ANSYS CFX</i> .	41
Figura 3.13 – Propriedades e condições de fronteira impostos nas simulações do <i>ANSYS CFX</i> .	42
Figura 3.14 - Resultados do <i>ANSYS CFX</i> acerca do comportamento do fluxo de calor na face quente e fria da célula	42
Figura 3.15 - Representação das resistências elétricas da junção de um TEG	44
Figura 3.16 – Dimensões do condutor metálico (cobre) com a representação do caminho que a corrente percorre.	44

Figura 3.17 – Esquema da célula acerca dos diversos tipos de calor a ter em conta no <i>MATLAB</i> .....	47
Figura 3.18 - Definição das condições de fronteira no ANSYS TE .....	49
Figura 4.1 – Módulos termoeletrónico .....	52
Figura 4.2 – Esquema dos módulos termoeletrónicos.....	52
Figura 4.3 – Tensão em vazio em função da diferença de temperatura entre as faces dos módulos <i>RS</i> [29].....	53
Figura 4.4 – Potência em função da diferença de temperatura entre as faces dos módulos <i>RS</i> [29]. ....	53
Figura 5.1 – Potência elétrica (esquerda) e potência elétrica por área de módulo (direita) em função da diferença de temperatura, comparando os diversos métodos de cálculo.....	61
Figura 5.2 – Perfil de temperatura ao longo das interfaces do módulo para condições standard, espessura do $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ (3.0mm). Contendo o peso relativo das várias resistências térmicas ( <i>shape factor</i> ).....	62
Figura 5.3 – Perfil de temperatura para as espessuras de material TE de 0.5mm (vermelho) e 3.0mm (azul), contendo o peso relativo das várias resistências térmicas para 0.5mm( <i>shape factor</i> ).....	63
Figura 5.4 – Potência elétrica e resistência elétrica interna em função da espessura do $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , para três valores diferentes de espessura de Alumina e de resistências de contacto térmicas ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ e $\rho_c=6 \times 10^{-9} \Omega \cdot \text{m}^2$ )( <i>shape factor</i> ). ....	64
Figura 5.5 – Influência da espessura do $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ na Potência elétrica para diferentes valores de coeficientes transferência de calor de contacto ( $h_c$ , em $\text{W}/\text{m}^2\text{K}$ ), para uma espessura da alumina de 1.0mm e resistividade elétrica de contacto de $6 \times 10^{-9} \Omega \cdot \text{m}^2$ ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ )( <i>shape factor</i> ).....	65
Figura 5.6 - Influência da espessura do $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ na Potência elétrica para diferentes valores de resistividades elétricas de contacto ( $\rho$ , em $\Omega \cdot \text{m}^2$ ), para uma espessura da alumina de 1.0mm e coeficiente de transferência de calor de contacto de $19000 \text{ W}/\text{m}^2\text{K}$ ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ )( <i>shape factor</i> ). ....	66
Figura 5.7 – Potência por unidade de volume de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ e a eficiência em função da espessura do telureto de bismuto, ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ )( <i>Shape factors</i> ). ....	67
Figura 5.8 – Potência térmica e elétrica em função do $\Delta T$ para uma espessura 0.5 e 3.0mm de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , representando cada um para condições adiabáticas e com condução de ar ( <i>ANSYS CFX</i> ). ....	68
Figura 5.9 – Diferença de temperatura nas faces do $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ (para as espessuras 0.5 e 3.0mm) em função dos diversos métodos de cálculo para um $\Delta T=200^\circ\text{C}$ . ....	69
Figura 5.10 - Diferença de temperatura nas faces do $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ (para as espessuras 0.5 e 3.0mm) em função dos diversos métodos de cálculo para um $\Delta T=100^\circ\text{C}$ . ....	71
Figura 5.11 – Potência térmica de entrada do módulo (para os $\Delta T=200^\circ\text{C}$ e $100^\circ\text{C}$ ) em função dos diversos métodos de cálculo para a espessura de 0.5mm de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . ....	73
Figura 5.12 - Potência térmica de entrada do módulo (para os $\Delta T=200^\circ\text{C}$ e $100^\circ\text{C}$ ) em função dos diversos métodos de cálculo para a espessura de 3.0mm de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . ....	75
Figura 5.13 – Peso percentual das diversas potências térmicas para a espessura de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ de 0.5mm ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ )( <i>MATLAB</i> ).....	76

Figura 5.14 - Peso percentual das diversas potências térmicas para a espessura de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ de 3.0mm ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ )( <i>MATLAB</i> ).....	76
Figura 5.15 – Potência térmica, potência de <i>Peltier</i> e corrente elétrica em função da espessura do $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ( $\Delta T=200$ )( <i>MATLAB</i> ).....	77
Figura 5.16 – Potências envolvidas nos módulos TE em função da espessura do $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ( $\Delta T=200$ )( <i>MATLAB</i> ).....	78
Figura 5.17 - Potência elétrica de saída do módulo (para os $\Delta T=200^\circ\text{C}$ e $100^\circ\text{C}$ ) em função dos diversos métodos de cálculo para a espessura de 0.5mm de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ .....	79
Figura 5.18 - Potência elétrica de saída do módulo (para os $\Delta T=200^\circ\text{C}$ e $100^\circ\text{C}$ ) em função dos diversos métodos de cálculo para a espessura de 3.0mm de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ .....	80
Figura 5.19 – Perfil de temperaturas tendo a temperatura da face fria do módulo a $50^\circ\text{C}$ (linha azul) ou com água a circular a uma temperatura de $25^\circ\text{C}$ (linha vermelha) para a espessura de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ de 3.0mm ( <i>MATLAB</i> ).....	82
Figura 5.20 - Perfil de temperaturas tendo a temperatura da face fria do módulo a $50^\circ\text{C}$ (linha azul) ou com água a circular a uma temperatura de $25^\circ\text{C}$ (linha vermelha) para a espessura de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ de 0.5mm ( <i>MATLAB</i> ).....	83
Figura 5.21 – Temperatura da água de arrefecimento de entrada (linha azul) e de saída (linha vermelha) em função da espessura do telureto de bismuto para garantir a temperatura da face fria do módulo de $50^\circ\text{C}$ ( <i>MATLAB</i> ), para um caudal de arrefecimento de 50 L/h.....	84
Figura 5.22 – Contorno do fluxo de calor na face de saída da junção no <i>ANSYS TE</i> para uma espessura de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ de 3.0mm sem carga elétrica ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ ). ....	85
Figura 5.23 – Contorno do fluxo de calor na face fria da célula termoeletrônica no <i>ANSYS CFX</i> . ....	86
Figura 5.24 – Perfil de temperaturas para uma junção com uma espessura de 3mm de $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ e um $\Delta T=200^\circ\text{C}$ , no <i>ANSYS TE</i> . ....	87
Figura 5.25 – Densidade de corrente ao longo do material termoeletrônico, apresentado pelo <i>ANSYS TE</i> . ....	87
Figura 5.26 – Calor libertado por efeito Joule às faces do material termoeletrônico, apresentado pelo <i>ANSYS TE</i> .....	88



## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Características dos módulos termoeletrônicos para as temperaturas de face quente e fria de 250 e 50°C [29].....	53
Tabela 2 - Dimensões da alumina (cerâmica) do módulo para uma célula elementar.....	54
Tabela 3 - Dimensões e propriedades do condutor metálico para uma célula elementar [4]. ....	55
Tabela 4 - Dimensões e propriedades do elemento TE (tipo P) para uma célula elementar [4]. ....	55
Tabela 5 - Dimensões e propriedades do elemento TE (tipo N) para uma célula elementar [4].....	56
Tabela 6 - Dimensões e propriedades da interface de contacto Alumina-cobre para uma célula elementar [4].....	56
Tabela 7 - Dimensões e propriedades da interface de contacto Cobre-elemento TE para uma célula elementar [4]. ....	57
Tabela 8 - Dimensões da carga que se irá usar nas simulações do <i>ANSYS-TE</i> .....	57
Tabela 9 – Parâmetros de entrada e a sua gama de variação usada no presente estudo.....	58
Tabela 10 – Desvios percentuais da diferença de temperatura nas faces do $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ dos métodos de cálculo tomando a <i>ANSYS TE</i> com e sem carga como referência. ....	72
Tabela 11 - Desvios percentuais da potência elétrica dos métodos de cálculo tomando o <i>ANSYS TE</i> como referência. ....	81



## LISTA DE ACRÓNIMOS

TEG	Gerador termoeletrico
TE	Termoeletrico

## LISTA DE VARIÁVEIS

<i>Símbolo</i>	<i>Descrição</i>	<i>Unidade</i>
$\Delta T$	<i>Variação de temperatura</i>	$^{\circ}\text{C}$
$\Delta V$	<i>Variação de potencial</i>	$V$
$\Delta x$	<i>Direção do gradiente térmico</i>	$m$
$A$	<i>Área</i>	$m$
$A_{Ar}$	<i>Área de secção onde esta inserido o ar</i>	$m$
$A_{Contacto}$	<i>Área de secção da interface de contacto</i>	$m$
$A_{Contacto\_Al/Cu}$	<i>Área de contacto da interface Alumina-Cobre</i>	$m$
$A_{Contacto\_Cu/TE}$	<i>Área de contacto da interface Cobre-Telureto de bismuto</i>	$m$
$A_{f\_Metal}$	<i>Área de secção do conduto metálico (cobre) no lado frio</i>	$m$
$A_{q\_Metal}$	<i>Área de secção do conduto metálico (cobre) no lado quente</i>	$m$
$A_{TE}$	<i>Área de secção do Telureto de bismuto</i>	$m$
$h_{Contacto}$	<i>Coeficiente de transferência de calor de contacto</i>	$W/m^{\circ}\text{C}$
$I$	<i>Corrente</i>	$A$
$k$	<i>Condutividade térmica</i>	$W/m^{\circ}\text{C}$
$k_{Ar}$	<i>Condutividade térmica do ar</i>	$W/m^{\circ}\text{C}$
$k_{f\_Metal}$	<i>Condutividade térmica do condutor metálico (cobre) do lado frio</i>	$W/m^{\circ}\text{C}$
$k_{q\_Metal}$	<i>Condutividade térmica do condutor metálico(cobre) do lado quente</i>	$W/m^{\circ}\text{C}$
$k_{TE}$	<i>Condutividade térmica do Telureto de bismuto</i>	$W/m^{\circ}\text{C}$
$K$	<i>Coeficiente de Thomson</i>	
$L$	<i>Espessura</i>	$m$
$L_{ar}$	<i>Espessura da coluna de ar</i>	$m$
$L_{f\_Metal}$	<i>Espessura do condutor metálico (cobre) do lado frio</i>	$m$

$L_{q\_Metal}$	<i>Espessura do condutor metálico (cobre) do lado quente</i>	<i>m</i>
$L_{TE}$	<i>Espessura do Telureto de Bismuto</i>	<i>m</i>
$N_{junções}$	<i>Número de junções</i>	<i>-</i>
$P_E$	<i>Potência elétrica</i>	<i>W</i>
$P_{E\_max}$	<i>Potência elétrica máxima</i>	<i>W</i>
$\dot{q}_{med}$	<i>Fluxo de calor</i>	<i>W/m²</i>
$Q_{Joule}$	<i>Potência térmica gerada pelo efeito Joule</i>	<i>W</i>
$Q_{Peltier\_frio}$	<i>Potência térmica gerada pelo efeito Peltier no lado frio</i>	<i>W</i>
$Q_{Peltier\_quente}$	<i>Potência térmica gerada pelo efeito Peltier no lado quente</i>	<i>W</i>
$Q_{térmico}$	<i>Potência térmica</i>	<i>W</i>
$Q_{Thomson}$	<i>Potência térmica absorvida ou libertada por efeito Thomson</i>	<i>W</i>
$R_1$	<i>Resistência térmica total do caminho 1</i>	<i>K/W</i>
$R_2$	<i>Resistência térmica total do caminho 2</i>	<i>K/W</i>
$R_3$	<i>Resistência térmica total do caminho 3</i>	<i>K/W</i>
$R_4$	<i>Resistência térmica total do caminho 4</i>	<i>K/W</i>
$R_5$	<i>Resistência térmica total do caminho 5</i>	<i>K/W</i>
$R_{Ar}$	<i>Resistência térmica do ar</i>	<i>K/W</i>
$R_{Carga}$	<i>Resistência elétrica da carga</i>	<i>Ω</i>
$R_{Contacto\_Al/Cu}$	<i>Resistência de contacto da interface Alumina-Cobre</i>	<i>K/W</i>
$R_{Contacto\_Cu/TE}$	<i>Resistência de contacto da interface Cobre-Telureto de Bismuto</i>	<i>K/W</i>
$R_{elemento\_TE}$	<i>Resistência elétrica do material termoeletrónico</i>	<i>Ω</i>
$R_E$	<i>Resistência elétrica</i>	<i>Ω</i>
$R_{E\_Contacto}$	<i>Resistência elétrica de contacto</i>	<i>Ω</i>
$R_{E\_Material}$	<i>Resistência elétrica do material</i>	<i>Ω</i>
$R_{E\_Metal}$	<i>Resistência elétrica do condutor metálico (cobre)</i>	<i>Ω</i>

$R_{f\_Alumina}$	<i>Resistência térmica da Alumina do lado frio</i>	$K/W$
$R_{f\_Metal}$	<i>Resistência térmica do condutor metálico (cobre) do lado frio</i>	$K/W$
$R_{i\_Total}$	<i>Resistência elétrica interna do módulo</i>	$\Omega$
$R_{q\_Alumina}$	<i>Resistência térmica da Alumina do lado quente</i>	$K/W$
$R_{q\_Metal}$	<i>Resistência térmica do condutor metálico (cobre) do lado quente</i>	$K/W$
$R_{T\_Contacto}$	<i>Resistência térmica de contacto</i>	$K/W$
$R_{T\_Material}$	<i>Resistência térmica do material</i>	$K/W$
$R_{T\_Total}$	<i>Resistência térmica total</i>	$K/W$
$R_{TE}$	<i>Resistência térmica do telureto de bismuto</i>	$K/W$
$S$	<i>Fatores de forma (Shape factor)</i>	$m$
$T_{frio}$	<i>Temperatura da face fria do módulo</i>	$^{\circ}C$
$T_{frio\_TE}$	<i>Temperatura da face fria do telureto de bismuto</i>	$^{\circ}C$
$T_{quente}$	<i>Temperatura da face quente do módulo</i>	$^{\circ}C$
$T_{quente\_TE}$	<i>Temperatura da face quente do telureto de bismuto</i>	$^{\circ}C$
$V$	<i>Tensão</i>	$V$
$V_0$	<i>Tensão em aberto (ou em vazio)</i>	$V$
$V_{Carga}$	<i>Tensão em carga</i>	$V$
$ZT$	<i>Figura de mérito</i>	-
$\alpha$	<i>Coeficiente de Seebeck</i>	$V/^{\circ}C$
$\alpha_N$	<i>Coeficiente de Seebeck do material termoeletrico do tipo N</i>	$V/^{\circ}C$
$\alpha_P$	<i>Coeficiente de Seebeck do material termoeletrico do tipo P</i>	$V/^{\circ}C$
$\pi$	<i>Coeficiente de Peltier</i>	-
$\rho$	<i>Resistividade elétrica</i>	$\Omega.m^2$
$\rho_C$	<i>Resistividade elétrica de contacto</i>	$\Omega.m$
$\rho_{elemento\_TE}$	<i>Resistividade elétrica do material termoeletrico</i>	$\Omega.m$
$\rho_{Material}$	<i>Resistividade elétrica do material</i>	$\Omega.m$

$\rho_{Metal}$	<i>Resistividade elétrica do condutor metálico (cobre)</i>	$\Omega.m$
----------------	--	------------





# 1. Introdução

---

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 Enquadramento Geral

Desde do século XVIII que os humanos têm usado os combustíveis fósseis para produzir energia, principalmente para propósitos de transporte. Felizmente, os combustíveis conhecidos tem vindo a melhorar e serem fabricados em maior quantidade graças á descoberta de novas fontes de petróleo como óleo e gás de xisto e areias betuminosas. Mas mesmo assim, estes recursos são limitados e frequentemente extraídos em países politicamente instáveis, aumentando as preocupações de segurança. Além disso, as emissões de poluentes (HC, CO, NO<sub>x</sub>, PM) e gases de efeito de estufa (CO<sub>2</sub>) associados ao seu uso tem vindo aumentar mundialmente embora tem se criado legislações rigorosos com o intuito de diminuir as emissões por veículo para níveis muito inferiores dos que à 50 anos atrás (100 vezes mais baixo no caso de poluentes e metade no caso de emissões de CO<sub>2</sub> e consumo de fuel) [1]. Devido a isso, tem se verificado uma intensa investigação em Motores de combustão interna em busca de reduzir as emissões de poluentes e de gases efeito de estufa e, não esquecendo, aumentar a eficiência dos mesmos. Porém, os motores de combustão interna tem um rendimento de cerca de 30%, tendo como principal problema o desperdício de energia para os sistemas de arrefecimento (a 90°C) e a entalpia dos gases de escape (entre 300 a 900°C) [1]. A 2ª lei da termodinâmica limita a eficiência energética, daí ainda estarmos longe de um motor energeticamente eficiente.

Uma grande parte da energia desperdiçada deveria se transformar, idealmente, em trabalho útil. É importante especificar a temperatura ( $T_i$ ) na qual se dá a dissipação de calor, de forma a se quantificar o trabalho máximo produzido ( $W_{max}$ ):

$$W_{max} = Q_i \left( 1 - \frac{T_0}{T_i} \right) \quad \text{Eq. 1.1}$$

Onde  $Q_i$  é o calor perdido entre  $T_i$  e  $T_0$  sendo a temperatura atmosférica.

Comparando o potencial de recuperação em trabalho, no caso do fluido do circuito de arrefecimento num motor de combustão interna é de 0.18 (assumindo  $T_0=25^\circ\text{C}$ ), enquanto que nos gases de exaustão é de 0.61 para um temperatura de  $500^\circ\text{C}$ . Isto demonstra que é 3.5 vezes mais vantajoso para recuperar a mesma quantidade de potência térmica dos gases de exaustão do que do fluido do circuito de arrefecimento. Mesmo à temperatura de  $250^\circ\text{C}$  o potencial de recuperação de calor é de 0.43, o que continua a ser o valor significativo.

Existem diversos métodos para converter calor em trabalho, mas muitos deles envolvem o uso de máquinas térmicas como as que são usados no ciclo de *Rankine* e de *Stirling* [1]. Mais comum para temperaturas baixas, *Organic Rankine Cycles* (ORC) usam pequenas turbinas onde o vapor expandido provoca a rotação das mesmas produzindo trabalho ou eletricidade [2]. Estes ciclos termodinâmicos têm a vantagem de serem eficientes, porém requerem um grande espaço e são mecanicamente complexos e de certa forma frágeis, o que se torna problemático para aplicações de transporte. Principalmente, eles tornam-se difíceis na instalação para veículos de baixo peso.

A transformação dos recentes automóveis num tipo de máquinas híbridas onde a produção de eletricidade tem sido cuidadosamente manuseada. Quando o carro está ligado, a eletricidade tem de ser gerada a partir da potência do motor, reduzindo a eficiência no geral. Este é o caso onde é vantajoso produzir eletricidade do desperdício de energia do motor, nomeadamente, a partir da entalpia dos gases de escape. Descartando ciclos termodinâmicos, a solução parece estar num sistema simples para recuperação de calor em eletricidade, como os geradores termoeletrônicos (TEG) [3].

Os TEG fornecem um simples caminho para reaproveitar algum do desperdício de entalpia dos gases de escape. Eles não tem partes em movimento, são fiáveis e compactos. Infelizmente, os atuais TEG têm algumas desvantagens como a sua baixa eficiência e baixa tolerância para altas temperaturas, onde teoricamente tem melhor desempenho. Têm sido feitos esforços para ultrapassar a densidade de energia e os restringimentos de custos dos TEG através do uso de materiais que são mais abundantes que os módulos baseados em telúrio (mais baratos) e no qual conseguem operar a temperaturas mais elevadas aumentando o potencial de recuperação [3].

## 1.2 Objetivos e motivações

Este projeto tem como principal objetivo criar métodos de cálculo de forma a estudar as diversas variáveis que influenciam o desempenho dos módulos termoeletrônicos. A criação de diversas abordagens de cálculo permite a investigação dependentemente do grau de rigor que se deseja. Para além disso, torna-se importante destacar parâmetros que influenciam fortemente os módulos termoeletrônicos. Um dos objetivos deste projeto também passa pelo estudo da redução da espessura do material termoeletrônico sem comprometer o seu desempenho, de forma a

reduzir os custos do material. Para tal, iniciou-se uma investigação na influência da espessura do material termoeletrico, mas também do substrato cerâmico. A inserção dos efeitos de *Peltier* e *Joule* num tipo de cálculo também foi uma forte motivação para esta trabalho, já que até agora, poucas foram as investigações acerca desses efeitos.

### 1.3 Organização e estruturação da dissertação

Esta dissertação está estruturada em seis capítulos. Os dois primeiros capítulo são introdutórios e servem para enquadrar e situar o trabalho. No primeiro capítulo, 'Introdução' refere-se a relevância do projeto no contexto geral, ou seja, relata-se a importância ambiental e económica relativamente a recuperação de calor e o uso de módulos termoeletricos. Também são referidos nesse capítulo as motivações que levaram à realização desta dissertação, assim como, os objetivos que se definiram para a mesma. O segundo capítulo, contém numa primeira parte a fundamentação teórica para uma boa compreensão do 'Estado da Arte' e, evidentemente, do resto do trabalho. São referidos os fenómenos da Termoeletricidade, onde é explicado o principio de funcionamento dos módulos termoeletricos e os fenómenos elétricos nos quais se baseia. Posteriormente, faz-se uma breve abordagem à transferências de calor realçando os fenómenos físicos em jogo, em especial os que vão ser abordados neste trabalho. Depois de concluído e esclarecido os conceitos teóricos, o capítulo termina com o 'Estado da Arte'. Nesta parte, é levado a cabo a revisão bibliográfica sobre os módulos termoeletricos e as diversas formas de otimização que existem hoje em dia.

No capítulo três, explica-se o funcionamento e processo de cálculo para cada uma das abordagens criadas nesta dissertação. Tem como objetivo explicar o que cada tipo de abordagem faz e os efeitos em que se baseia. À medida que se vai referir cada método explica-se a limitações que este tem assim como as vantagens que oferece teoricamente. Os métodos são divididos principalmente em dois grupos: os métodos que somente simulam os fenómenos térmicos e os modelos que simulam os fenómenos térmicos e elétricos simultaneamente.

No capítulo quatro, são caracterizados os módulos termoeletricos em termos dimensionais. São abordadas as propriedades físicas que possuem os materiais que servirão como parâmetros de referência. Depois de isso estar definido, termina-se o capítulo ao mencionar a gama de parâmetros de entrada que se simulou os módulos termoeletricos.

O capítulo cinco dedica-se essencialmente a alma desta dissertação, os resultados e ao trabalho produzido. Neste capítulo, são analisados em detalhe os resultados que se obteve e

compreender a sua natureza. São analisados a influência de algumas variáveis no desempenho do módulo termoeletrico como espessura do material termoeletrico e resistências de contacto. A comparação e validação dos métodos de cálculo também são objeto de uma análise intensa realçando uns que tem para oferecer relativamente aos outros. A integração do módulos numa espécie de gerador termoeletrico também foi alvo de um breve estudo, no qual, se vão analisar os seus efeitos.

O último capítulo, intitulado de 'Conclusões e Trabalho Futuro', contém as conclusões técnicas de todo o trabalho. É referido nesta parte, as sugestões no qual um trabalho futuro acerca dos módulos termoeletricos se pode vir a basear com o intuito de melhorar os seu desempenho.



## 2. Conceitos teóricos e Estado da Arte

---

## 2 CONCEITOS TEÓRICOS E ESTADO DA ARTE

### 2.1 Introdução

Neste capítulo vai-se tratar numa primeira parte dos conceitos teóricos com o intuito de servir como matéria de suporte para a compreensão do estado da arte, que se situa na última parte deste capítulo. A fundamentação teórica é constituída pelo subcapítulo ‘Termoeletricidade’ e ‘Transferência de calor’, que constituem a base dos fenómenos térmicos e elétricos dos módulos termoeletrônicos. No ‘Estado da Arte’ apresenta-se a revisão bibliográfica que foi feita ao longo de todo o trabalho.

### 2.2 Termoeletricidade

A termoeletricidade baseia-se no fenómeno da conversão de uma diferença de temperatura entre os materiais ou ao longo de um material num potencial elétrico ou vice-versa. Um módulo termoeletrónico gera uma tensão elétrica a partir de um diferencial de temperatura. Para estudar estes dispositivos torna-se necessário conhecer os fenómenos que lhe estão associados. Tais fenómenos são os efeitos de *Seebeck*, *Peltier* e *Thomson*. Neste capítulo serão estudados tais conceitos para uma melhor compreensão dos efeitos em que se baseiam os módulos termoeletrónicos [4].

#### 2.2.1 Efeito de *Seebeck*

Thomas Seebeck descobriu, em 1820, que o ponteiro de uma bússola foi desviada na presença de junções de um circuito fechado de dois metais distintos ou semicondutores na presença de uma diferença de temperatura [5] [6]. Uma diferença de temperatura entre as junções de dois materiais diferentes provoca o aparecimento de uma tensão elétrica. Este efeito é quantificado pelo coeficiente *Seebeck*.

$$\alpha = \frac{\Delta V}{\Delta T} \quad \text{Eq. 2.1}$$

Olhando para a Figura 2.1, pode-se observar em concreto a representação esquemática deste fenómeno através da movimentação dos eletrões de uma junção constituída por dois condutores distintos.



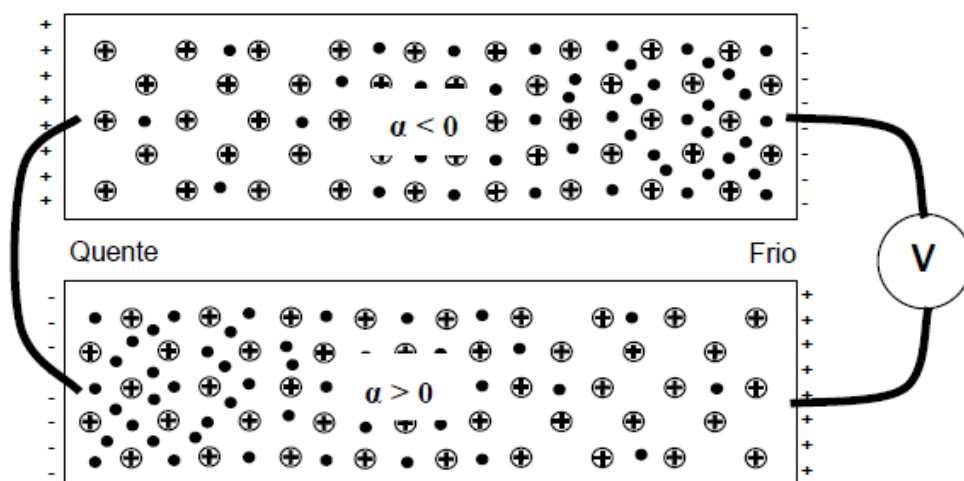


Figura 2.1 – Movimento dos elétrons de uma junção quando os materiais são submetidos a uma diferença de temperatura gerando um potencial elétrico [7].

Quando um condutor é aquecido e arrefecido nas suas extremidades, os elétrons da zona quente ficam excitados e tendem a movimentarem-se para zonas de energia mais baixas. Desta maneira, o coeficiente de *Seebeck* é positivo ou negativo dependendo do sentido em que os elétrons se deslocam. Observando a Figura 2.1, os dois condutores tem coeficientes de *Seebeck* diferentes. Ora, no condutor superior, com um coeficiente de *Seebeck* negativo, os elétrons deslocam-se da zona quente para a zona fria, criando-se assim uma diferença de potencial elétrico. No condutor inferior, com um coeficiente de *Seebeck* positivo, os elétrons movimentam-se da zona fria para a zona quente, gerando um potencial elétrico nos terminais dos dois condutores na região fria, que é proporcional à diferença de temperatura entre as regiões quente e fria [4]. Esta relação é traduzido pela Eq. 2.2 que é, no fundo, uma reorganização da Eq. 2.1:

$$\Delta V = (T_{quente} - T_{frio}) \times (\alpha_1 - \alpha_2) \quad \text{Eq. 2.2}$$

A partir do efeito de *Seebeck* existem dois modos de operação distintos: em circuito aberto ou fechado. Basicamente em circuito aberto, a diferença de potencial gerada a partir de uma diferença de temperatura é medida, que é o que acontece nos termopares (Figura 2.2).

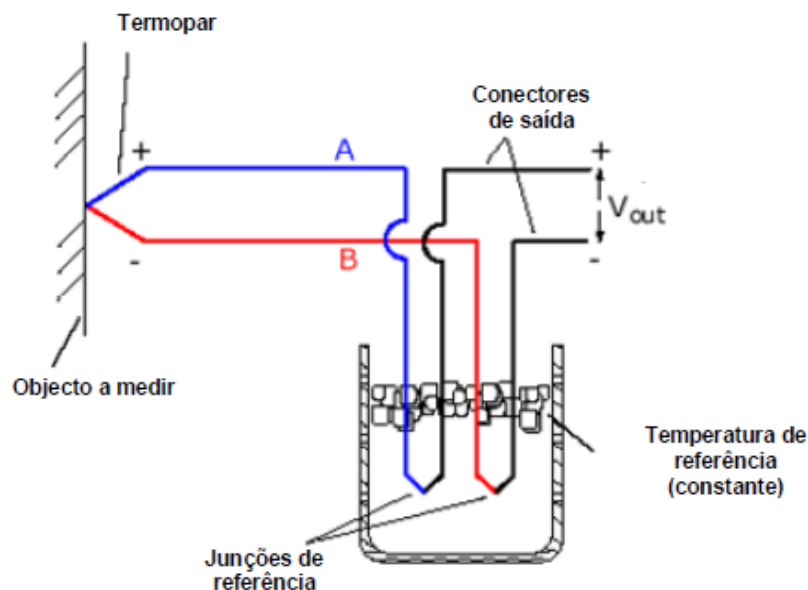


Figura 2.2 – Princípio de funcionamento de um termopar [7].

Observando a Figura 2.2, verifica-se a fonte de calor que se quer medir a temperatura, em contacto com uma junção bem como a outra extremidade dos condutores mergulhada num banho de gelo. O facto de estarem parcialmente mergulhados num banho de gelo tem como objetivo servir como ponto de referência, pois neste princípio só permite medir diferença de temperaturas. A partir disto gera-se uma diferença de potencial [8]. Em circuito fechado, adiciona-se uma carga para fechar o circuito produzindo, consequentemente, uma corrente elétrica e entrando assim no modo de geração de energia, ou seja, o caso dos módulos termoeétricos. Na Figura 2.3 pode-se observar o princípio de funcionamento de uma junção de um módulo termoeétrico. Uma fonte de calor aquece a junção quente, provocando o movimento dos eletrões nos elementos termoeétricos do tipo P e tipo N.

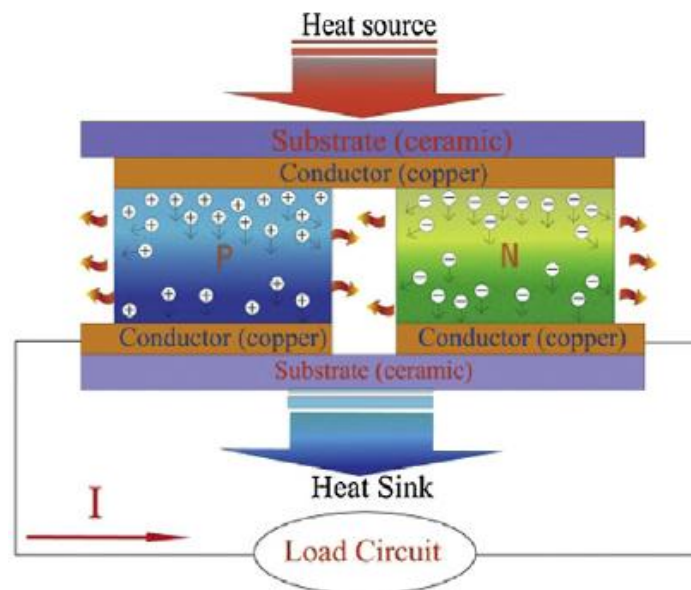


Figura 2.3 – Junção PN de um módulo termoeétrico [9].

O do tipo P possui o coeficiente de *Seebeck* positivo, enquanto que a do tipo N possui o coeficiente de *Seebeck* negativo. Na junção fria ocorre dissipação de calor, tendo como opção adicionar um sistema para otimizar a transferência de calor, como por exemplo um sistema de arrefecimento. A existência da carga, como foi dito anteriormente, tem como objetivo fechar o circuito gerando uma corrente elétrica no mesmo. Na Figura 2.4 pode-se observar a constituição genérica de um módulo termoeétrico.

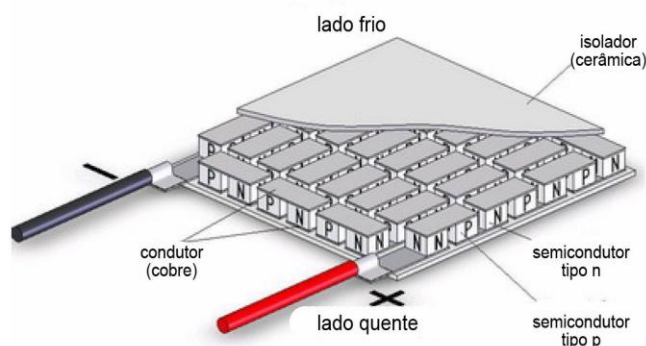


Figura 2.4 – Esquema geral de um módulo termoeétrico [10].

Um módulo termoeétrico é constituído por  $N_{\text{Junções}}$  semelhantes, ligadas eletricamente em série. Desta maneira a diferença de potencial obtida nos terminais do módulo será a soma da diferença de potencial em cada junção. Termicamente, as junções estão ligadas em paralelo, ou seja, a diferença de temperatura é aproximadamente igual em cada junção.

### 2.2.2 Efeito de *Peltier*

Em 1834, Jean Peltier descobriu um efeito complementar ao efeito *Seebeck*, quando reparou que havia alterações de temperatura na junção formada por materiais distintos, quando percorridas por uma corrente elétrica. Ele veio a verificar que quando a junção de dois materiais distintos é percorrida por uma corrente elétrica, energia térmica é libertada ou absorvida nesta junção. O sitio por onde a energia é libertada ou absorvida depende do sentido da corrente [11] [7], como está representado na Figura 2.5.

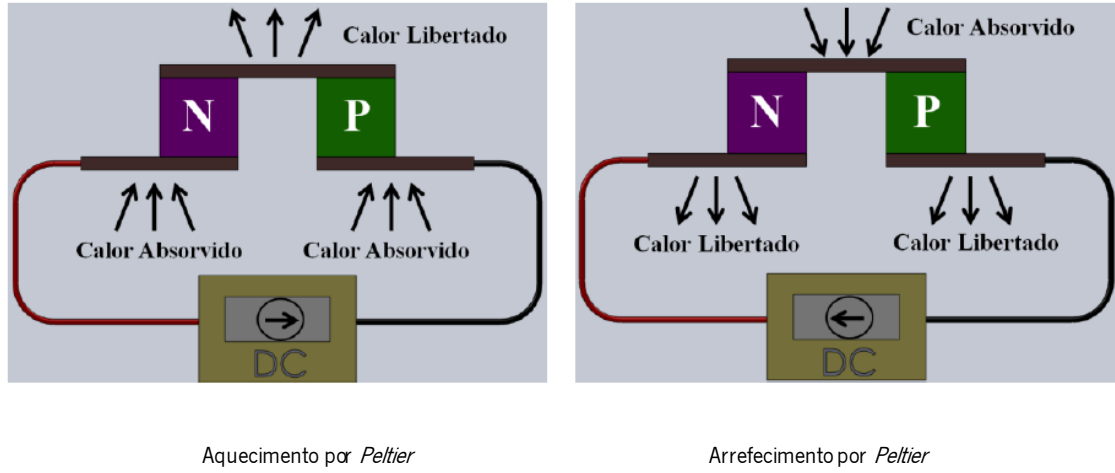


Figura 2.5 – Modos de operação do efeito *Peltier* [4]

Pela Figura 2.5 pode-se observar o efeito do sentido da corrente no efeito *Peltier* nas junções, onde na imagem a) liberta calor na parte superior da junção, funcionando como aquecedor e na imagem b) o calor é absorvido na parte superior da junção, funcionando como arrefecedor [4]. Este efeito é quantificado pelo coeficiente *Peltier*,  $\pi$ , e normalmente a sua determinação pode ser relacionada com o coeficiente *Seebeck* pela equação seguinte, em que  $T$  representa a temperatura da junção, em Kelvin:

$$\pi = \alpha \cdot T \quad \text{Eq. 2.3}$$

A quantidade de calor absorvida ou libertada também pode ser quantificado em cada junção, resultante do efeito *Peltier*:

$$\dot{Q}_{Peltier_{quente}} = (\alpha_P - \alpha_N) \times T_{quente} \times I \quad \text{Eq. 2.4}$$

$$\dot{Q}_{Peltier_{frio}} = (\alpha_P - \alpha_N) \times T_{frio} \times I \quad \text{Eq. 2.5}$$

### 2.2.3 Efeito Thomson

Em 1851, William Thomson (Lord Kelvin), concluiu que quando um condutor elétrico for submetido a uma diferença de temperatura e simultaneamente é percorrido por uma corrente elétrica se dá o fenómeno de absorção e libertação de calor no mesmo. Basicamente, o efeito *Thomson* depende do comportamento do fluxo de eletrões relativamente à diferença de temperatura.

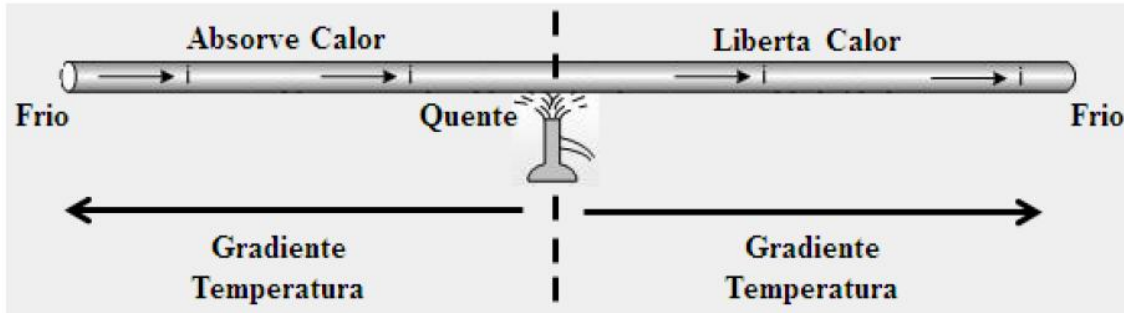


Figura 2.6 – Demonstração do efeito de *Thomson* [4].

Observando a Figura 2.6, se a corrente flui da zona fria para a quente do condutor, então dá-se uma absorção de calor por parte deste. Se a corrente flui da zona quente da zona fria do condutor, então há libertação de calor. Isto é, num condutor que esteja a temperatura uniforme não se dá o efeito *Thomson*. Este efeito é quantificado pelo o coeficiente de *Thomson*,  $K$ , que se traduz pelo quociente entre variação do coeficiente de *Seebeck* ( $\Delta\alpha$ ) e a variação da temperatura ( $\Delta T$ ):

$$K = T \times \frac{\Delta\alpha}{\Delta T} \quad \text{Eq. 2.6}$$

Comparando o efeito de *Joule* e de *Peltier* com o efeito *Thomson*, este efeito é pouco significativo porque é função da variação do coeficiente de *Seebeck* com a temperatura e por isso apenas é significativo para grandes variações de temperaturas. Isso faz com que seja incluído poucas vezes em modelos teóricos [4]. A quantidade de calor libertado ou absorvido pelo efeito *Thomson* ( $Q_{Thomson}$ ) é quantificado pela equação:

$$Q_{Thomson} = -Ki\Delta T \quad \text{Eq. 2.7}$$

Onde  $i$  representa a densidade da corrente elétrica.

## 2.2.4 Efeito *Joule*

Nos módulos termoeletricos, para além dos efeitos referidos anteriormente, existem outros fenómenos a ter em consideração. Quando uma corrente ( $I$ ) percorre uma resistência oferecida por um material qualquer ( $R_E$ ), ocorre libertação de energia ( $\dot{Q}_{Joule}$ ), devido ao efeito *Joule*. Este efeito pode ser descrito pela equação:

$$\dot{Q}_{Joule} = R_E \times I^2 \quad \text{Eq. 2.8}$$

Como se pode observar, a potência térmica gerada pelo efeito *Joule* é proporcional ao quadrado da corrente que percorre o material. Mas sabendo que a corrente é definida pelo quociente entre a tensão e a resistência elétrica:

$$I = \frac{V}{R_E} \quad \text{Eq. 2.9}$$

Então, substituindo a Eq. 2.9 na Eq. 2.8, pode-se também apresentar a potência por efeito *Joule* sob a seguinte forma:

$$\dot{Q}_{Joule} = \frac{V^2}{R_E} \quad \text{Eq. 2.10}$$

Para além da corrente ou da tensão elétrica, o efeito *Joule* depende também da resistência do material por onde a corrente atravessa. Naturalmente, a resistência elétrica depende do material usado e das suas dimensões, sendo fundamental conhecer a resistividade do material. O efeito *Joule* não ocorre somente ao longo do volume do material, mas também nas interfaces de contacto entre os materiais, que possuem uma resistência de contacto. Assim, o efeito *Joule* irá estar presente por onde quer que passa a corrente, ou seja, no elemento termoeletrico, no condutor elétrico e nas suas interfaces de contacto, como demonstrado na Figura 2.7.

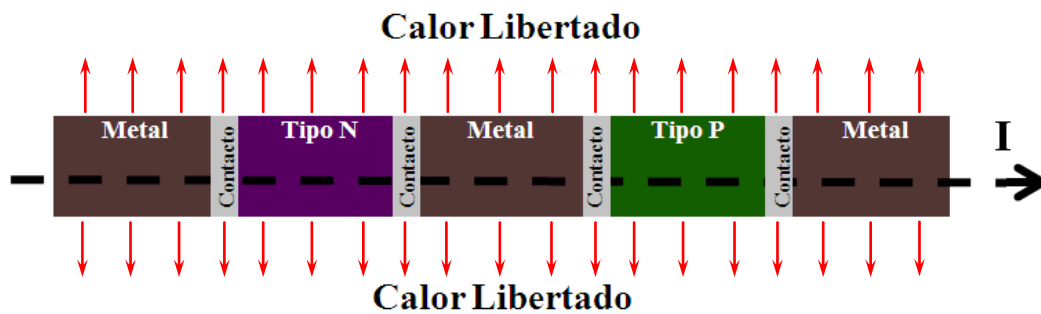


Figura 2.7 – Efeito *Joule* que ocorre ao longo de uma Junção [4].

Tendo em conta que a resistência elétrica do condutor metálico é muito mais baixa comparativamente com a do elemento termoeletrico, normalmente verifica-se um efeito *Joule* muito maior no material termoeletrico, a não ser que a secção do condutor esteja fortemente subdimensionada. Considera-se, geralmente, que é libertado calor de igual forma tanto na junção quente como na junção fria, isto é, metade do calor é libertado na zona fria e outra metade na zona quente [4] [7].

### 2.2.5 Classificação dos Materiais

Os materiais termoeletricos são geralmente caracterizados quanto ao seu desempenho pela figura de mérito, que na sua forma adimensional,  $ZT$ , toma a seguinte forma:

$$ZT = \frac{\alpha \times T}{k \times \rho} \quad \text{Eq. 2.11}$$

Onde  $\alpha$  é coeficiente de *Seebeck*,  $k$  a condutividade térmica,  $\rho$  a resistividade elétrica e  $T$  a temperatura absoluta do material. Pela Eq. 2.11, quanto maior for o coeficiente de *Seebeck* de um certo material, maior será a tensão gerada a partir de uma diferença de temperatura, ou seja, melhor será a figura de mérito. Quanto menor for a condutividade térmica, menor será o fluxo de calor que atravessa o material termoeletrico desde da face quente até á face fria, isto é, maior será a diferença de temperatura entre as faces e maior será a tensão gerada. Quanto a resistividade elétrica, esta deverá ser o menor possível de forma a resistência á corrente seja o menor possível proporcionando um menor efeito *Joule*. Logo, um bom material termoeletrico deverá ter um coeficiente de *Seebeck* e condutividade elétrica o mais alto possível e uma condutividade térmica o mais baixa possível[23].

## 2.3 Transferência de calor

Do estudo da termodinâmica, sabe-se que a entalpia pode ser transferida através de interações do sistema com a vizinhança quando existir uma diferença de temperatura entre eles, para tal, torna-se necessário conhecer os métodos de transferência de calor [12].

A primeira lei da termodinâmica baseia-se no principio da conservação da energia, isto é, a energia não se cria nem se destrói, simplesmente se transforma. A energia, durante uma interação, pode mudar de forma mas no cômputo geral ela mantém-se constante. Por exemplo,

se se esfregar as mãos uma contra a outra, elas aquecem. Isto deve-se a conversão da energia em forma de trabalho para calor. Tendo isto em consideração, a energia que entra num sistema é igual a que sai do mesmo mais a acumulação de energia [12].

$$\Delta E = E_{entra} - E_{sai} \quad \text{Eq. 2.12}$$

A segunda lei da termodinâmica, refere que quando dois sistemas estão em interação, a energia vai se transferir de um para o outro até se atingir o equilíbrio térmico, ou seja, a transferência ocorre sempre no sentido decrescente do gradiente térmico. Por exemplo, o gelado à temperatura ambiente derrete, pois como ele está inserido num meio mais quente, o ambiente cede energia para o gelado até entrar em equilíbrio térmico com o mesmo. Basicamente, enquanto a primeira lei da termodinâmica se refere a conservação da energia em si, a segunda lei estabelece condições para que as transformações termodinâmicas possam ocorrer [13].

Existem diversas formas de ocorrer transferências de calor, como a convecção térmica, radiação térmica, condução térmica e mudança de fase. A convecção térmica consiste na transferência de calor entre um corpo e um fluido em contacto com a sua superfície que estão a temperaturas distintas. Como esta ilustrado na Figura 2.8, por exemplo, a base do copo está a ser aquecida por um maçarico. A base vai estar a uma temperatura superior ( $T_A$ ) que a água ( $T_B$ ), que vai induzir a transferência de calor da superfície sólida para o fluido.

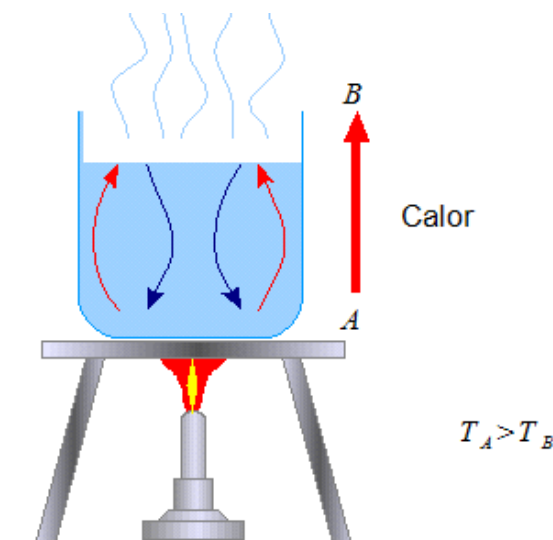


Figura 2.8 – As diversas formas de transferência de calor [14].

Existem diversas formas transferência de calor por convecção como: convecção natural e convecção forçada. Independentemente da natureza do processo de convecção, a equação geral é:



$$\dot{q} = h(T_s - T_\infty) \quad \text{Eq. 2.13}$$

Onde  $\dot{q}$  representa o fluxo de calor,  $h$  o coeficiente de transferência de calor,  $T_s$  a temperatura da superfície e  $T_\infty$  a temperatura do fluido [12].

A radiação é a energia que é emitida pela matéria sob a forma de ondas eletromagnéticas. É a única forma de transferência de calor que pode ocorrer em vácuo. Por exemplo, na Figura 2.8 existe radiação entre a chama do maçarico e o prato, aquecendo a mesma já que a temperatura da chama é maior que o prato. A equação geral, para a transferência de calor por radiação térmica entre um corpo e um ambiente que o envolve é a seguinte:

$$\dot{q} = \epsilon \sigma (T_s^4 - T_v^4) \quad \text{Eq. 2.14}$$

No qual,  $\epsilon$  é a emissividade do material,  $\sigma$  a constante de Stefan-Boltzmann e  $T_s$  e  $T_v$  representam as temperaturas absolutas do material e da vizinhança em questão. No caso da transferência de calor por radiação entre dois corpos, existe também a influência dos fatores geométricos como a distância e a forma dos objetos, que pode ser tratado, por exemplo, através do uso de fatores de forma, conforme descrito em [12].

A condução térmica baseia-se na transferência de calor pela propagação da agitação molecular entre partículas contínuas, devido ao acréscimo da sua energia cinética por aumento da temperatura. Por exemplo, no prato, descrito na Figura 2.8, está a ocorrer condução de calor já que uma das suas faces está a ser aquecida pelo maçarico e, consequentemente, está a uma temperatura superior do que a face oposta. Logo, este calor vai ser transferido por condução ao longo da espessura do prato. A equação geral que traduz a condução térmica é:

$$\dot{q} = -k \frac{\Delta T}{\Delta x} \quad \text{Eq. 2.15}$$

Onde  $k$  representa a condutividade térmica do material e  $x$  é a direção do gradiente térmico [12].

Por vezes, existe condução térmica mesmo em gases. Por exemplo nos vidros duplos que são usados nas janelas das habitações, pois a espessura é tão pequena que em vez de ocorrer um processo de convecção, é mais fácil ocorrer uma condução térmica por agitação molecular do ar. Nesta dissertação, o estudo vai se focar somente neste tipo de transferência de

calor, pois nos espaços vazios dos módulos a espessura é pequena demais para que ocorra convecção natural. A convecção forçada também não existirá, pois os módulos estão resguardados do exterior.

## 2.4 Introdução ao estado da arte

Os motores de combustão interna têm um rendimento de cerca de 30% e a maior parte do que é desperdiçado é dissipado sob a forma de calor através do escape e do sistema de arrefecimento. Tendo em conta que se atravessa uma era em que as questões ambientais assumem um papel muito importante, sendo fundamentais e crescentes as preocupações com a eficiência energética torna-se relevante o esforço para reduzir o desperdício energético em veículos. Esta perda de energia tem sido reconhecida como tendo potencial de aproveitamento para a geração de energia elétrica com recursos, nomeadamente, a módulos termoeletricos.

### 2.4.1 Módulos termoeletricos

Os módulos termoeletricos são dispositivos sólidos, sem componentes móveis, compactos, fiáveis e silenciosos em que ao contrário de outros sistemas, não usa um fluido de trabalho para a recuperação de calor a não ser o movimento dos eletrões. Não emitem gases de efeito de estufa e tornam-se ideais para pequenas aplicações de geração de energia [15].

A investigação acerca dos TEG já advém do século XIX com a descoberta do efeito Seebeck pelo alemão Thomas Seebeck. Contudo o seu uso a nível comercial, nunca foi verdadeiramente estabelecido devido às suas baixas eficiências e elevados custos por unidade de potência produzida. A junção de semicondutores, veio revolucionar o seu funcionamento com a introdução de materiais termoeletricos semicondutores do tipo-P e tipo-N [5].

A implementação de TEG para reaproveitar o calor vindo dos gases de escape para a geração de energia elétrica tem sido objeto de investigação nas últimas décadas. Crane D. fez um estudo de um gerador termoeletrico contendo um permutador de calor arrefecido a ar em sentido contra corrente. Resultados demonstraram ser possível obter uma potência elétrica de saída de 1kW sem especificarem ao certo o tamanho do permutador [16]. Em 2011, o grupo BMW conseguiu integrar geradores termoeletricos num BMW X6 a produzir 600W de energia elétrica e economizar até 1.3% no combustível [17]. Niu Z. preocupou-se em investigar o canal de exaustão dos gases de escape e a sua optimização e estudou parâmetros como o tamanho do

canal, o número de canais, o número de separadores e o seu ângulo. Com os resultados do seu modelo numérico veio verificar que deve-se incluir separadores somente antes do fluido chegar a um TEG com o objetivo de aumentar a transferência de calor e evitar fenômenos diminuição de pressão dentro do canal [9]. Recentemente fez-se um estudo acerca do limite teórico da geração de energia termoeletrica a partir dos gases de escape. A questão centrava se um maior número de módulos termoeletricos era sempre benéfico para o um gerador coletar energia termoeletrica. Chegou-se á conclusão que existe um número ótimo de módulos TE que maximiza a extração de energia para qualquer sistema e que adicionar mais módulos para além do ponto ótimo (potência elétrica máxima) pode, de facto degradar o desempenho do sistema. Na Figura 2.9 está representado esse efeito para três diferentes rácios de capacidade calorífica [18]. Esta rácio é o quociente da capacidade calorífica entre o fluido de arrefecimento e os gases de escape do gerador.

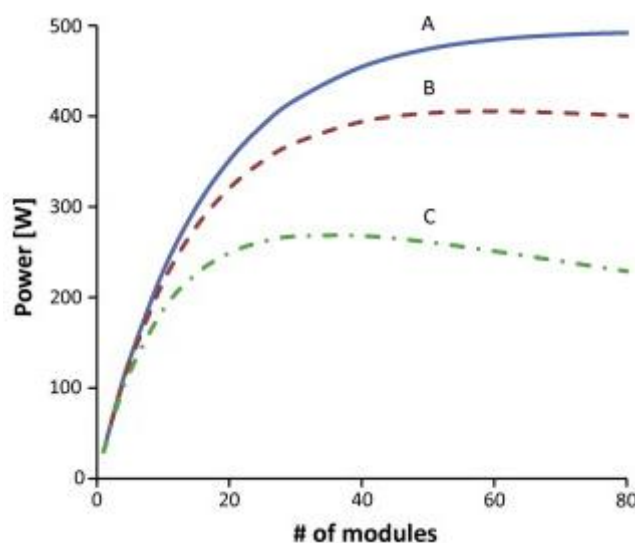


Figura 2.9 - Potência máxima versus número de módulos no sistema para três ratio de capacidades caloríficas diferentes onde (A) rácio=10, (B) rácio=3, e (C) rácio=1. [18]

N. Nguyen testou os módulos termoeletricos em regime transiente e veio a verificar que o efeito *Thomson* no domínio térmico não tem grandes implicações, porém na geração de potência elétrica tem um impacto que poderá não ser desprezável [19]. Preocupações como baixa eficiência dos módulos e a sua inviabilidade económica fizeram com que investigadores se debruçassem com a otimização dos módulos termoeletricos em si. Hoje em dia verifica-se

principalmente dois métodos para melhorar a eficiência dos TEM: pela pesquisa de novos materiais termoeétricos e a otimização da geometria dos módulos.

## 2.4.2 Materiais termoeétricos

Uma das formas de aprimorar a eficiência do módulo passa pelo estudo dos materiais termoeétricos. Muitos dos materiais termoeétricos tinham baixas tolerâncias a altas temperaturas, onde teoricamente operam melhor. Hoje em dia existem inúmeros materiais que são objeto de investigação pela parte da comunidade científica. Na Figura 2.10 está representado a figura de mérito de alguns materiais termoeétricos comuns em função da temperatura.

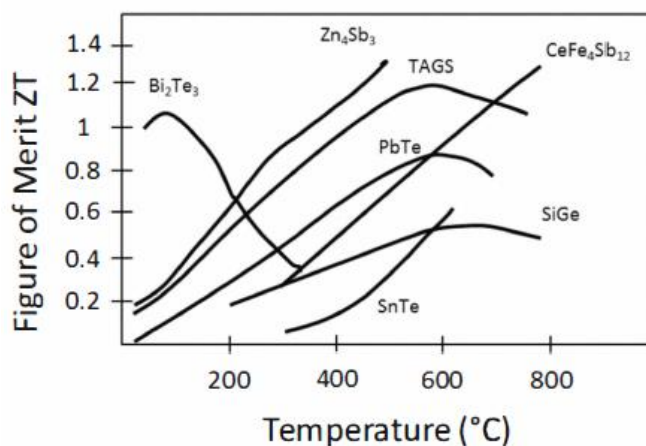


Figura 2.10- Figura de mérito de diversos materiais termoeétricos comuns no mercado [20] [11].

O semiconductor telureto de Bismuto ( $\text{BiTe}$ ) é o material mais comum e usado nos TEG recentemente pois, em termos comerciais, é usado por falta de alternativas viáveis. Porém, este material só aguenta temperaturas na ordem dos  $250^\circ\text{C}$ , a partir daí o coeficiente de *Seebeck* decai para valores muito baixos. Não esquecendo também que o telúrio é um material tóxico, volátil a altas temperaturas e raro, daí ser muito caro. O  $\text{SiGe}$  é usado em aplicações especiais como na NASA, pois consegue operar a temperaturas até aos  $1000^\circ\text{C}$  com uma boa figura de mérito ( $ZT \approx 0.7$ ). As skutterudites tem sido dos materiais mais investigados recentemente, apesar de conter na sua composição química pequenas quantidades de elementos muito raros na terra como Rênio (Re). Tem como característica uma figura de mérito relativamente elevada a temperaturas de operação na ordem dos  $700^\circ\text{C}$  [20]. Para a gama intermédia de temperaturas ( $250\text{-}650^\circ\text{C}$ ) tem se estudado muito também a família dos Mg-Mn silicatos, dada pelas vantagens de grande abundância do material, custos de produção mais baixos, uma boa figura

de mérito ( $ZT \approx 1.1$ ) e maior a compatibilidade com o ambiente. Os novos métodos de fabricação deste material permitem para além de um aumento na figura de mérito, a produção em larga escala deste material [21]. Alguns investigadores têm estudado recentemente o uso da nanotecnologia com o intuito de criar materiais nano estruturados para explorarem o fenómeno do confinamento quântico. O que concluíram foi que conseguiram aumentar figura de mérito por baixarem significativamente a condutividade térmica do material embora haja um pequeno aumento na resistividade elétrica resultante da introdução de nano partículas [22] [23]. Para o presente trabalho, não interessa ter uma grande margem de temperaturas que justifique o uso de um material a não ser o BiTe, logo o estudo se incidirá nesse material.

Muitos destes materiais são promissores embora apresentam ainda obstáculos à sua utilização em larga escala devido a problemas de estabilidade química e mecânica, bem como a dificuldade de produção em larga escala. A grande maioria não está além do mais disponível, comercialmente, a não ser para algumas equipas de investigação e fabricantes de automóveis.

### 2.4.3 Otimização da geometria dos módulos

Uma outra forma de melhorar a eficiência dos módulos termoeletrônicos, e onde este estudo se vai debruçar, consiste em otimizar a sua geometria, estudando em detalhe a influência de algumas variáveis que afetam o seu desempenho. Este não é afetado somente pelas propriedades dos materiais termoeletrônicos mas também pelo seu desenho geométrico e a resistência térmica dos vários materiais. A espessura do material termoeletrônico e a qualidade do contacto entre os materiais, por exemplo, influenciam fortemente a eficiência de um TEG.

J. Jang estudou o desempenho da geração de potência dos módulos termoeletrônicos usando métodos numéricos para determinar os parâmetros ótimos [24]. U. Erturun preocupou-se em analisar os esforços térmicos a que os módulos TE são sujeitos em função da geometria do elemento TE. Chegou à conclusão que as geometrias retangulares e cilíndricas são mais resistentes às tensões térmicas que as octogonais e trapezoidais. A tensão térmica das geometrias retangular e cilíndrico tem um valor de 49.9 MPa e 43.3MPa para uma diferença de temperatura de 100°C [25]. Em 2010, D.Ebling estudou a influência da espessura e a qualidade de contacto entre os materiais com auxílio do software *Multiphysics Simulation* e posteriormente comparou esses valores com resultados experimentais, fabricando módulos com diferentes espessuras. Teoricamente, antecipou que a influência da resistência de contacto diminui á

medida que se aumenta a espessura do material termoeétrico. Na Figura 2.11 e Figura 2.12 pode-se observar os resultados do *Multiphysics Simulation*, em que se demonstra o impacto da resistência de contacto na figura de mérito equivalente do módulo para diferentes espessuras [26].

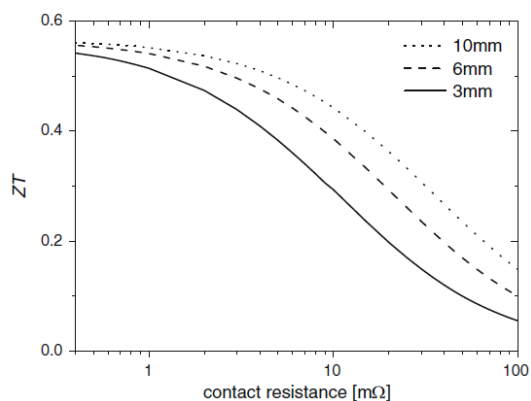


Figura 2.11 - Resultados da simulação: impacto da resistência elétrica de contacto nos valores de  $ZT$  do módulo para diferentes espessuras de material TE [26].

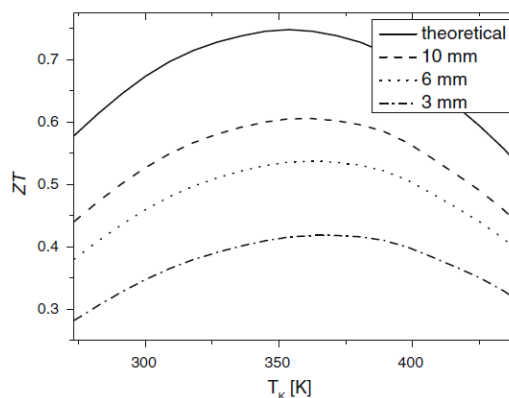


Figura 2.12 – Resultados da simulação: valores de  $ZT$  do módulo versus valores de temperatura da parte fria para diferentes espessuras de material TE [26].

Através da Figura 2.11 e Figura 2.12 pode-se constatar que os resultados das simulações vão de encontro às previsões teóricas. Isto é, a diminuição do valor  $ZT$  com o aumento da resistência de contacto é reduzida para maiores valores de espessura do material TE. Na Figura 2.12 pode se evidenciar que o melhor desempenho do módulo obteve-se para uma espessura de 10mm de material TE [26].

Na fabricação dos módulos, ligaram as suas interfaces a partir de uma solda medindo a resistência de contacto. No Figura 2.13 demonstra o resultados obtidos dos autores em relação a comparação dos resultados experimentais com os resultados das simulações e das previsões teóricas.

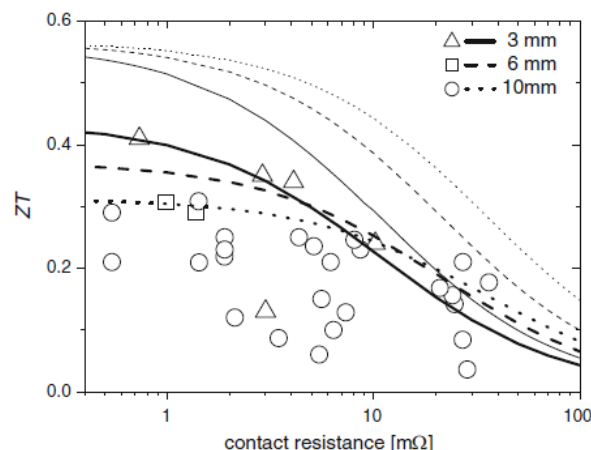


Figura 2.13 – Impacto da resistência de contacto na figura de mérito dos módulos para diferentes espessuras de Material TE: comparação entre os resultados experimentais (triângulos, quadrados e círculos) com resultados numéricos, com (linha grossa) e sem (linha fina) os efeitos de radiação e convecção. A variação do tipo de linha refere-se a diferentes espessuras de material TE [26].

Numa primeira parte, os resultados, foram de acordo com as previsões teóricas, ou seja, o valor  $ZT$  aumenta à medida que se diminui a resistência de contacto. Porém, módulos com espessuras de 3 mm de material TE demonstraram ter melhor desempenho comparando com os módulos de maiores espessuras. Todavia, as previsões teóricas não incluem efeitos de radiação e convecção. A adição desses efeitos (linhas mais grossas), tornaram as previsões teóricas mais aceitáveis comparando com os resultados experimentais. Mas segundo os autores é necessário recordar que essas inclusões nas previsões teóricas não passam de uma estimativa pois não se sabe as temperaturas locais do ar que rodeia o módulo e o tipo de transferência de calor por convecção. Contudo essa perda de calor podia explicar o comportamento inverso do desempenho nas espessuras dos módulos. Os autores concluíram que as previsões acerca de maiores espessuras de material termoeétrico teriam melhor desempenho não foi suportado pelos resultados experimentais devido ao fenómeno de transferência de calor por convecção e radiação [26]. É de grande relevo apontar que a otimização de  $ZT$  não indica necessariamente a maximização da potência elétrica, mas apenas o rendimento. Daí que seja necessário analisar ambos os fatores para não tirar conclusões precipitadas.

H. Fateh preocupou-se em estudar a interdependência entre a otimização de variáveis como fração de ocupação dos elementos TE, espessura dos elementos TE, área dos elementos TE individuais, o espaço entre os elementos e a resistência de carga. O estudo centrou-se na otimização de um TEG integrado num sistema de permutadores de calor tanto na face quente como na face fria usando  $Mg_2Si$  e  $MnSi_{1.8}$  como materiais termoeétricos. Foi desenvolvido, numa

primeira fase um modelo numérico para analisar os parâmetros referidos anteriormente para depois, numa fase seguinte, validarem esses resultados com uma atividade experimental usando dois tipos de fabricação distintas. No modelo numérico, usou-se o método de diferenças finitas com o intuito de inserir as propriedades TE dependentes da temperatura. Para que fosse possível integrar a dependência da temperatura, dividiu-se o material termoeétrico em diversas parcelas como demonstrado na Figura 2.14 [27].

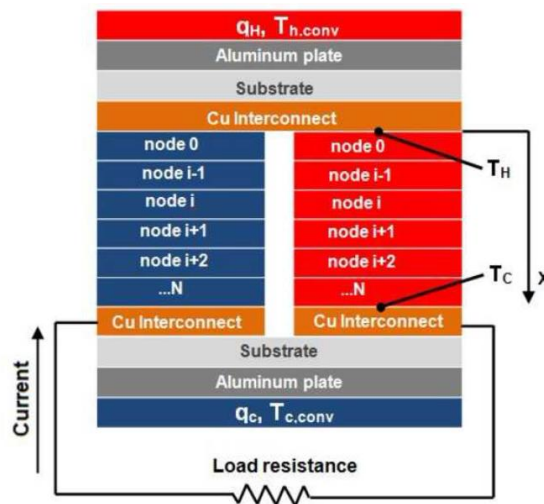


Figura 2.14 – Esquema do modelo numérico de uma junção [27].

Desta maneira calcula-se as propriedades para cada parcela para no final somar o seu conjunto. Por exemplo, para cada parcela é calculado o coeficiente de *Seebeck* e fazendo o somatório de todas as parcelas obtém-se o coeficiente de *Seebeck* total do material TE. Em termos de condições de fronteira, considerou-se a transferência de calor por convecção nas faces expostas dos elementos TE e desprezou-se a geração de calor por efeito Joule. Nas zonas da cerâmica (substrato) não ocupados pelos elementos TE considerou-se completamente adiabático. Os efeitos de radiação foram previamente simulados considerando os elementos termoeétricos como corpos negros e chegou-se à conclusão que as perdas de calor nos elementos TE é menos de 2% do total, por essa razão os seus efeitos foram desprezados [27]. Em relação à atividade experimental, foram fabricados dois tipos de dispositivos termoeétricos (1º e 2º geração). Os módulos da 1ª geração foram montados ligando o metal condutor (cobre) diretamente aos elementos termoeétricos por uma pasta comercial cinzenta com boa condutividade térmica e elétrica. A 2ª geração foi construído usando a técnica SPS ( *Spark Plasma Sintering*). Primeiro os materiais termoeétricos foram preparados usando SPS e numa fase posterior foi usado outra vez o SPS para ligar os eletródos de cobre nos elementos termoeétricos. Para as ligações



restantes usou-se então a pasta cinzenta para estruturar o módulo. Na medição das resistências de contacto elétrica nos módulos da 1ª e 2ª geração mostrou-se uma grande diminuição da mesma usando a técnica SPS ( de  $2.568\Omega$  para  $0.0148\Omega$ ) ligando os eletródos de cobre aos elementos TE em vez da pasta cinzenta [27]. Na realização da atividade experimental, usou-se um prato quente para a fonte quente e água a circular para a fonte fria. O Figura 2.15 e Figura 2.16 mostra a potência elétrica obtida com o modelo numérico e com a atividade experimental em função da diferença de temperatura.

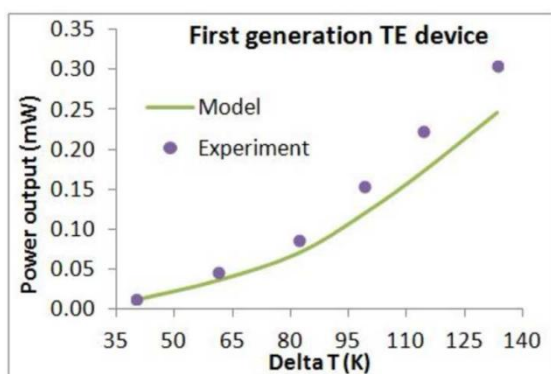


Figura 2.15 – Resultados experimentais e numéricos para potência elétrica em função da diferença da temperatura no material TE nos módulos da 1ª geração [27].

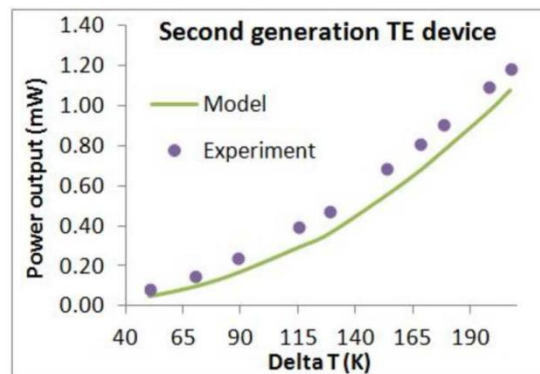


Figura 2.16 - Resultados experimentais e numéricos para potência elétrica em função da diferença da temperatura no material TE nos módulos da 2ª geração [27].

Pode-se observar através dos gráficos que nos módulos da 2ª geração, devido à sua baixa resistência de contacto elétrica, devolvem uma potência elétrica muito maior do que os da 1ª geração. O modelo numérico previu uma potência elétrica 20% inferior à experimental. Isto deveu-se às incertezas dos resultados experimentais e às aproximações falsas com o modelo numérico [27].

Nos resultados do modelo numérico, preocupou-se essencialmente em otimizar parâmetros como espessura do elemento TE, fração ocupada pelos elementos TE, razão entre a área do elemento TE e resistência da carga. Uma particularidade que se achou nos resultados obtidos foi que a máxima potência localiza-se dentro de uma curta gama do ratio da área do elemento entre os materiais tipo-N e o tipo-P enquanto que os outros três parâmetros podem variar em larga escala. Isto deve-se à dependência da temperatura das propriedades TE. Relativamente à resistência da carga, pode-se observar na Figura 2.17 o comportamento da potência elétrica para diferentes valores de resistência de carga.

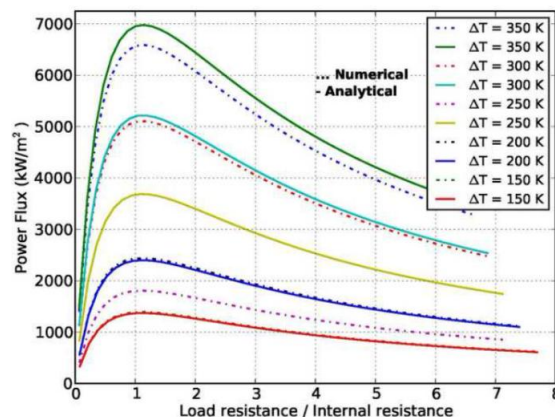


Figura 2.17 - Os efeitos da resistência de carga na potência elétrica por unidade de área do módulo termoeletrônico [27].

Olhando para a Figura 2.17, pode-se retirar que a potência só é máxima quando a resistência de carga é aproximadamente igual à resistência interna elétrica do módulo. Outra coisa que se pode retirar desse gráfico, é o facto da potência diminuir muito mais quando a resistência de carga for menor do que a resistência interna do que o contrário. Já que no caso oposto a potência tem a tendência de diminuir de uma forma muito mais gradual, conclui-se que para aplicação de sistemas práticos é preferível manter o valor da resistência de carga maior. Segundo a Figura 2.17, o método analítico prevê um potência muito maior que o modelo numérico pelo facto de trabalhar com propriedades TE constantes, baseado em temperaturas médias. Para pequenas diferenças de temperatura o erro não é muito, porém à medida que esta aumenta a mesma, o erro do método analítico pode-se tornar até mais que 10 % [27].

Para o estudo final, foram considerados dois casos diferentes no circuito térmico. No primeiro caso, assumiu-se desprezar a resistência de contacto térmica entre os elementos TE e o permutador de calor, ou seja, um caso em condições ideais. Para o segundo caso, incluiu-se todas as resistências de contacto tanto térmicas como elétricas. Os resultados para o primeiro caso estão demonstrados nos próximos quatro gráficos, em que Figura 2.18, Figura 2.19 e Figura 2.20 representa os resultados para as diferenças de temperatura de 300K, 400K e 500K. A primeira coisa que se pode retirar olhando para essas figuras é que existem múltiplas soluções na otimização da geometria do TEG, ou seja, para obter a mesma potência máxima, depende das diversas combinações de otimização de espessura do elemento TE, fração de ocupação dos elementos TE, ratio de área dos elementos TE e resistência de carga. Para uma determinada diferença de temperatura pode-se reparar que é possível atingir potência máxima para todo o tipo de fração de ocupação de elementos TE enquanto que se mantém a espessura de elementos TE otimizada, ou seja, o ratio entre a fração ocupada e a espessura de elementos TE

é constante. Para além disso, pode-se observar que número pequeno de elementos TE tem a mesma tendência de atingir a mesma potência máxima do que um maior número de elementos TE, isto é, uma pequena fração de ocupação com uma espessura menor de elementos TE consegue alcançar a mesma potência máxima do que uma maior fração de ocupação com uma maior espessura de elementos TE. Então, um pequeno volume de material TE pode atingir a mesma potência desde que a configuração geométrica esteja otimizada [27].

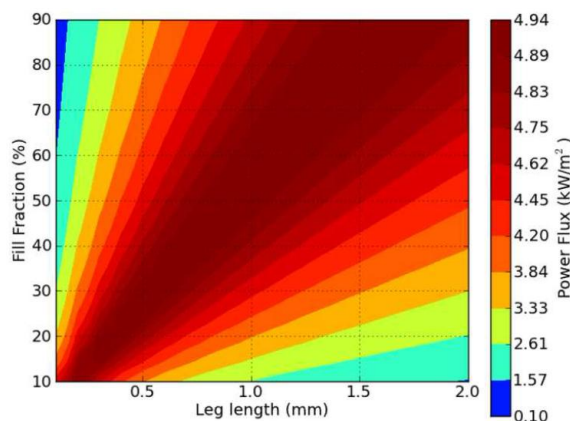


Figura 2.18 – Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE sem resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 300 K [27].

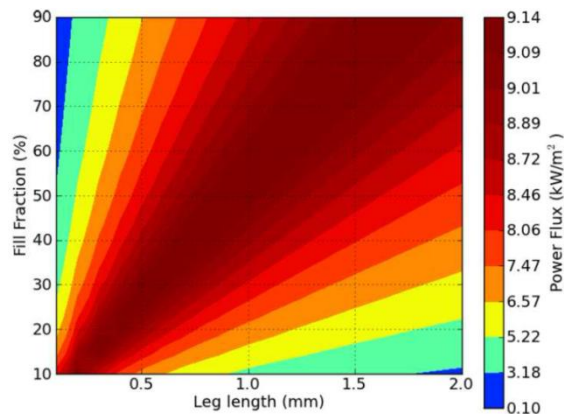


Figura 2.19 - Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE sem resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 400 K [27].

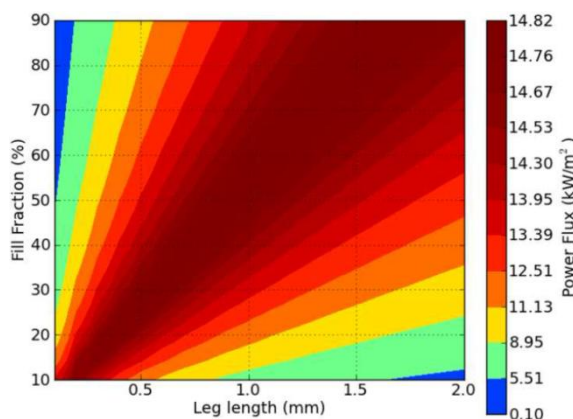


Figura 2.20 - Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE sem resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 500 K [27].

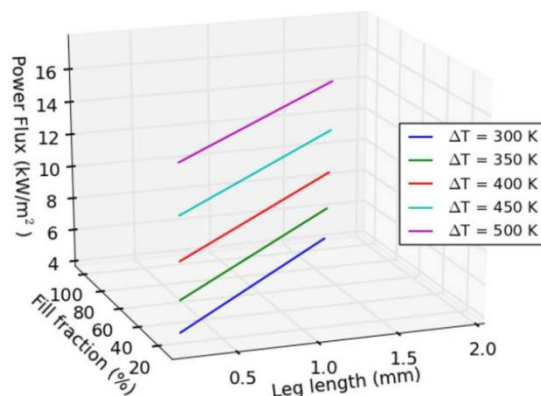


Figura 2.21 – Resumo dos resultados das três figuras anteriores [27].

Nos próximos quatro gráficos demonstra os resultados para o segundo caso em que se inclui o efeito da resistência de contacto térmica. O que se pode observar dos resultados é que a potência aumenta á medida que se aumenta a fração de ocupação e a espessura das pernas. Uma maior fração de ocupação significa um aumento da área dos elementos TE e uma

diminuição do efeito da resistência de contacto térmico e, conseqüentemente, uma maior diferença de temperatura devido a um aumento da resistência térmica e assim uma maior potência de saída. A resistência térmica total mantém-se a mesma, porém a diferença temperatura irá ser maior devido á maior resistência imposta pela espessura do elemento TE. Tal como no primeiro caso, os resultados estão expostos para uma temperatura 300K, 400K e 500K na Figura 2.22, Figura 2.23 e Figura 2.24 [27].

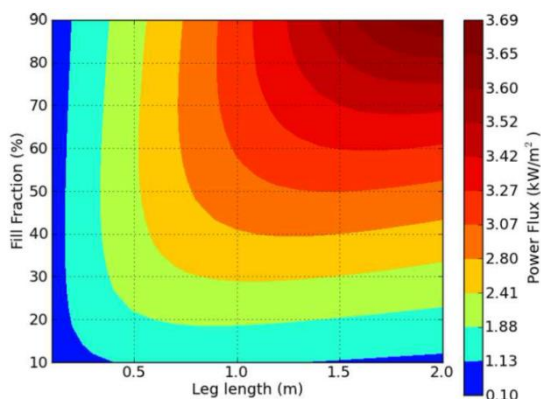


Figura 2.22 - Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE com resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 300 K [27].

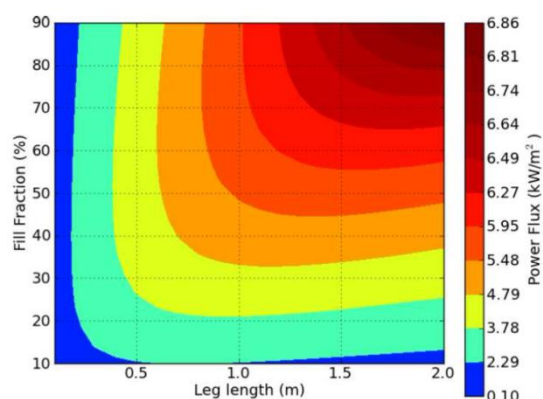


Figura 2.23 - Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE com resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 400 K [27].

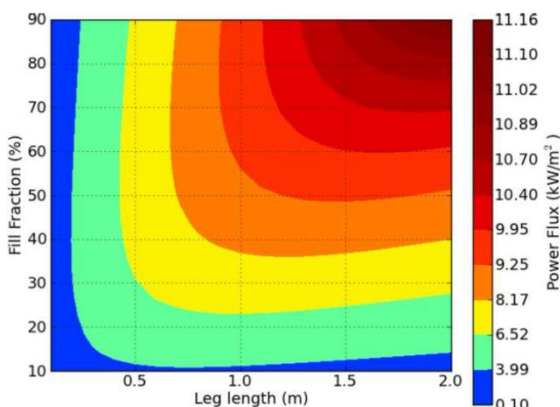


Figura 2.24 - Perfil de potência máxima versus fração de ocupação e espessura dos elementos TE com resistência de contacto térmico para um diferença de temperatura de 500 K [27].

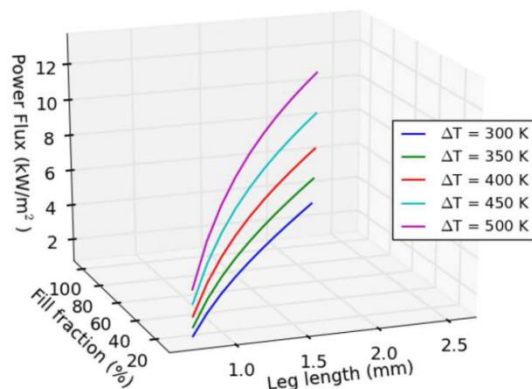


Figura 2.25 - Resumo dos resultados das três figuras anteriores [27].

Olhando para a Figura 2.22, Figura 2.23 e Figura 2.24, pode-se identificar que existe um ponto ótimo (onde a potência é máxima) de espessura de material termoeétrico para uma fração de

ocupação (fill fraction) constante.

Pode-se observar no Figura 2.26 o comportamento da potência máxima de saída em relação a resistência térmica de contacto.

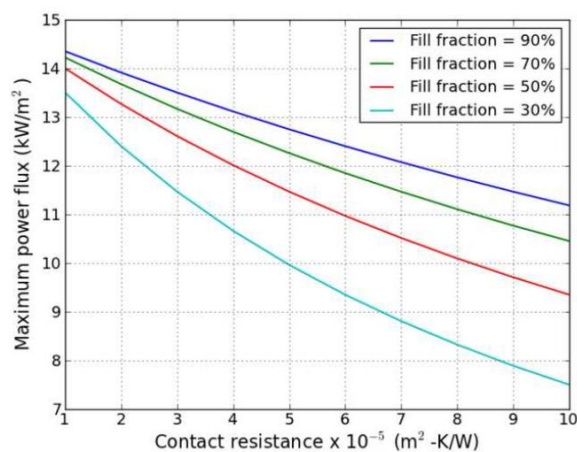


Figura 2.26 – Potência máxima elétrica por unidade de área versus resistência de contacto do módulo para diversas frações de ocupação [27].

Para uma fração ocupada de 90 % o comportamento da potência máxima é quase linear com a resistência térmica de contacto. Porém quando a fração ocupada é menor que isso, a relação torna-se não linear. Enquanto para uma fração de 30% e uma resistência de contacto de 0,00001 m² K/W perde-se aproximadamente 1% da potência máxima, para um resistência térmica de contacto de 0.0001 m² K/W a perda tem proporções de 52% [27].



### 3. Modelação e Simulação

---

## 3 MODELAÇÃO E SIMULAÇÃO

### 3.1 Introdução

Este capítulo trata as diversas abordagens que foram feitas para a construção do modelo termoeletrônico. Vai ser explicado o que está por trás de cada abordagem e as restrições e efeitos que cada uma apresenta. Os métodos de cálculo estão divididos em dois grupos: os que somente consideram efeitos térmicos e os que simulam o modelo elétrico também.

### 3.2 Modelo térmico

A modelação térmica foi feita por diversos métodos de cálculos, cada um com grau de complexidade diferente. Aumentando a complexidade de cálculo, mais fiável serão os seus resultados porém mais morosa será a sua realização da mesma:

1. Transferência de calor a 1D resolvido com circuito elétrico equivalente;
2. Transferência de calor a 1D resolvido com circuito elétrico equivalente e o uso de fatores de forma (*shape factors*) para compensar os efeitos 3D (fatores de forma calculados no *ANSYS CFX* para cada geometria, válido para condições múltiplas)
3. Modelação térmica detalhada dos efeitos 3D no *ANSYS CFX*;
4. Modelação térmica em *MATLAB* do gerador termoeletrônico resolvido com circuito elétrico equivalente e o uso de condução térmica de fatores de forma; integrando os efeitos de *Peltier* e *Joule*;
5. *ANSYS THERMAL-ELECTRIC (ANSYS TE)* o qual incorpora modelação do tipo Multiphysics utilizando a solução simultânea 3D do problema de transferência de calor com os efeitos elétricos e termoeletrônicos.

#### 3.2.1 Transferência de calor a 1D resolvido com circuito elétrico equivalente

A primeira abordagem é a mais simples, proporcionando cálculos diretos dos fenómenos de transferência de calor e temperaturas dentro do domínio do sistema, usando o software *Microsoft Office Excel*. Este modelo tem como principio de funcionamento um processo de iteração com o objetivo de atualizar os valores das propriedades dos materiais para cada ciclo de cálculo. Na Figura 3.1 pode-se observar o telureto de Bismuto (o elemento termoeletrônico). O



processo de transferência de calor acontece de uma forma multidirecional, porém é complexo e moroso aplicar um método de cálculo 3D. Assim, nesta abordagem vai-se desprezar esse efeito, considerando-se unicamente um fluxo de calor unidirecional, isto é, perpendicular às interfaces. Sabe-se que a transferência entre o domínio que cede calor e o item que recebe calor (denominado também por fonte quente e fonte fria) às temperaturas  $T_{\text{Quente}}$  e  $T_{\text{Frio}}$ , pode ser calculado obtendo as resistências térmicas que o fluxo de calor atravessa. Após calcular a resistência térmica total,  $R_{\text{total}}$ , a potência térmica,  $Q_{\text{térmico}}$ , pode ser obtida para uma determinada diferença de temperatura entre fonte quente e a fonte fria:

$$Q_{\text{térmico}} = \frac{T_{\text{Quente}} - T_{\text{Frio}}}{R_{T_{\text{Total}}}} \quad \text{Eq. 3.1}$$

Assumindo o fluxo de calor 1D, este irá atravessar as diversas camadas do elemento do módulo termoeletrico. Desta maneira, vão existir diversos caminhos paralelos diferentes que o fluxo de calor percorre pelas interfaces. Depois de uma análise cuidadosa, esses caminhos térmicos foram identificados, como demonstra a Figura 3.1.

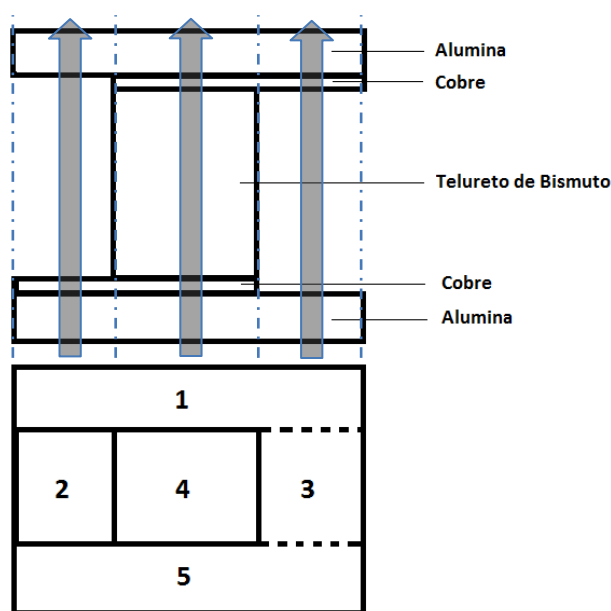


Figura 3.1 - Esboço da célula de um módulo termoeletrico considerado no modelo térmico a 1D com diferentes caminhos por onde o fluxo de calor passa (Vista de frente e abaixo a vista de cima)

No caminho 4, o fluxo de calor atravessa por condução todos os materiais existentes no TEG por esta ordem: substrato de alumina superior, elemento condutor (cobre) superior, elemento termoeletrico (Telureto de Bismuto), condutor cobre inferior e substrato de alumina inferior. No

caminho 1 e 5, o fluxo de calor atravessa exclusivamente o substrato de alumina cerâmica superior, o ar e o substrato inferior. Os caminhos 2 e 3 incluem o condutor metálico pelo menos na região inferior ou superior do elemento. É possível ter um melhor ponto de vista olhando para a Figura 3.2 que representa o circuito térmico equivalente.

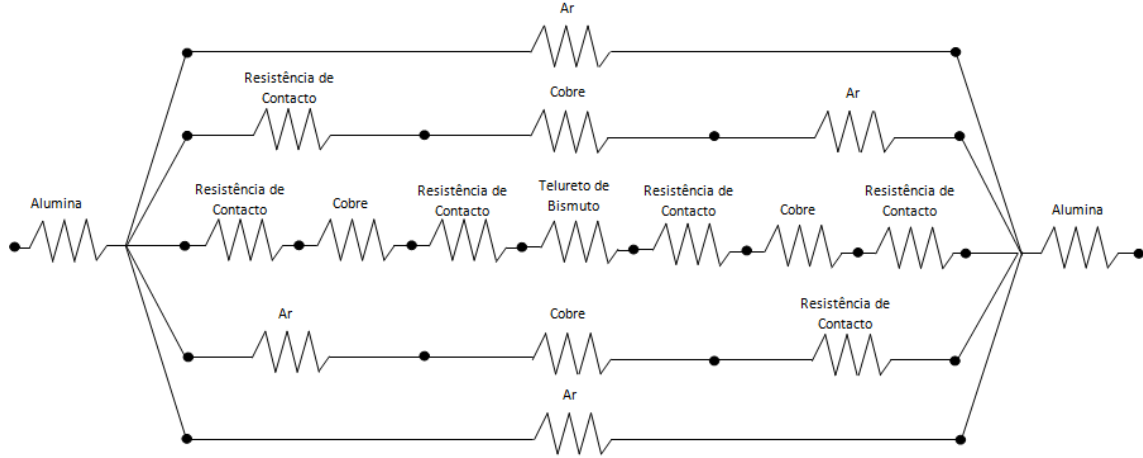


Figura 3.2 – Circuito térmico equivalente do modelo.

Como se pode verificar pela Figura 3.1 e Figura 3.2, o único material que está em série é o substrato cerâmico, a alumina. Tendo isso em conta, a resistência total ( $R_{Total}$ ) pode ser facilmente determinada somando as resistências do lado quente e frio da alumina ( $R_{q\_Alumina}$  e  $R_{f\_Alumina}$ ) e a resistência equivalente da secção paralela ( $R_{eq}$ ):

$$R_{T\_Total} = R_{q\_Alumina} + \frac{1}{\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_3} + \frac{1}{R_4} + \frac{1}{R_5}} + R_{f\_Alumina} \quad \text{Eq. 3.2}$$

Em que de  $R_1$  até  $R_5$  representa as resistências térmicas para cada caminho. A resistência por condução é calculada a partir da espessura,  $L$ , da área de secção ( $A$ ) e da condutividade térmica do material ( $k$ ):

$$R_{T\_Material} = \frac{L}{A * k} \quad \text{Eq. 3.3}$$

A resistência de contacto entre duas superfícies é obtida através do inverso do produto entre a área de contacto,  $A_{contacto}$ , e a condutância térmica de contacto,  $h_{contacto}$ :

$$R_{T\_contacto} = \frac{1}{A_{Contacto} * h_{Contacto}} \quad \text{Eq. 3.4}$$

Tendo em conta a Eq. 3.3 e Eq. 3.4, as expressões de  $R_1$  até  $R_5$  vão ser:

$$R_1 = R_5 = \frac{L}{A * k_{Ar}} \quad \text{Eq. 3.5}$$

$$\begin{aligned} R_2 &= R_{Contacto\_Al/Cu} + R_{q\_Metal} + R_{Ar} \\ &= \frac{1}{A_{Contacto\_Al/Cu} * h_{Contacto}} + \frac{L_{q\_Metal}}{A_{q\_Metal} * k_{q\_Metal}} \\ &\quad + \frac{L_{Ar}}{A_{Ar} * k_{Ar}} \end{aligned} \quad \text{Eq. 3.6}$$

$$\begin{aligned} R_3 &= R_{Ar} + R_{f\_Metal} + R_{Contacto\_Cu/Al} \\ &= \frac{L_{Ar}}{A_{Ar} * k_{Ar}} + \frac{L_{f\_Metal}}{A_{f\_Metal} * k_{f\_Metal}} \\ &\quad + \frac{1}{A_{Contacto\_Cu/Al} * h_{Contacto}} \end{aligned} \quad \text{Eq. 3.7}$$

$$\begin{aligned} R_4 &= R_{Contacto\_Al/Cu} + R_{q\_Metal} + R_{Contacto\_Cu/TE} + R_{TE} \\ &\quad + R_{Contacto\_TE/Cu} + R_{f\_Metal} + R_{Contacto\_Cu/Al} \\ &= \frac{1}{A_{Contacto\_Al/Cu} * h_{Contacto}} + \frac{L_{q\_Metal}}{A_{q\_Metal} * k_{q\_Metal}} \\ &\quad + \frac{1}{A_{Contacto\_Cu/TE} * h_{Contacto}} + \frac{L_{TE}}{A_{TE} * k_{TE}} \\ &\quad + \frac{1}{A_{Contacto\_TE/Cu} * h_{Contacto}} + \frac{L_{f\_Metal}}{A_{f\_Metal} * k_{f\_Metal}} \\ &\quad + \frac{1}{A_{Contacto\_Cu/Al} * h_{Contacto}} \end{aligned} \quad \text{Eq. 3.8}$$

A resistência total,  $R_{Total}$ , é obtida ao substituir as últimas quatro equações na Eq. 3.2 que, posteriormente, é usado para calcular a potência térmica,  $\dot{Q}_{Térmico}$ , na Eq. 3.1. Seguidamente, todas as diferenças de temperatura individuais, para uma determinada resistência térmica, podem ser calculadas pela potência térmica que atravessa interface em questão:

$$\Delta T = Q_{\text{térmico}} * R_{T\_Material} \quad \text{Eq. 3.9}$$

Tendo as diferenças de temperatura, é possível então calcular as temperaturas para cada interface para a primeira iteração. A partir desta expressão, pode se obter a temperatura para cada interface para ser usada na iteração seguinte.

$$\Delta T = T_1 - T_2 \quad \text{Eq. 3.10}$$

Todo este processo vai se repetir até ser atingida a convergência. Na Figura 3.3 ilustra a uma parte da folha de *Exce*/em que se aplica este princípio.

<b>Valores Estimados</b>					
<b>Temperatura da face quente</b>		250	200	175	150
Temperatura média da Cerâmica	°C	249,6769368	199,786221	174,8317423	149,8724683
Temperatura média do cobre	°C	246,376635	197,3386973	172,8017506	148,2553506
Temperatura da face 1 do módulo	°C	242,4710729	194,4084418	170,3594981	146,3012835
Temperatura da face 2 do módulo	°C	57,27053554	55,4545609	54,54605902	53,63728002
Temperatura média do cobre(2ªfase)	°C	53,36520928	52,52443932	52,10390045	51,68327399
Temperatura média da cerâmica (2ªfase)	°C	50,19410326	50,14541421	50,12113019	50,09687459
Temperatura do ar	°C	50,38820651	50,29082843	50,24226038	50,19374917
<b>Temperatura da face fria</b>		50	50	50	50
<b>Valores Calculados</b>					
<b>Temperatura da face quente</b>		250	200	175	150
Temperatura média da Cerâmica	°C	249,6769376	199,7862214	174,8317425	149,8724684
Temperatura média do cobre	°C	246,3766366	197,3386979	172,8017509	148,2553508
Temperatura da face 1 do módulo	°C	242,47	194,41	170,36	146,30
Temperatura da face 2 do módulo	°C	57,27	55,45	54,55	53,64
Temperatura média do cobre(2ªfase)	°C	53,36520994	52,52443969	52,10390071	51,68327415
Temperatura média da cerâmica (2ªfase)	°C	50,19410358	50,1454144	50,12113032	50,09687467
Temperatura do ar	°C	50,388	50,291	50,242	50,194
<b>Temperatura da face fria</b>		50,000	50,000	50,000	50,000

Figura 3.3 – Parte da folha de cálculo Excel que demonstra o processo de iteração usado neste método.

Cada coluna corresponde a um caso ou estudo em concreto, no caso da Figura 3.3 pode-se ver que se está estudar a diferença de temperatura, mais especificamente, variar a temperatura na face quente. O que se pode reparar na figura, é que se vê dois perfis de temperaturas idênticos, um com um preenchimento amarelo e outro verde. Isso porque o amarelo corresponde às temperaturas de entrada e o verde às temperaturas resultantes da operação de cálculo referente neste capítulo. Para se realizar a próxima iteração, copia-se os valores da zona verde e ‘cola-se como valores’ na zona amarela, dando assim na zona verde os valores de temperatura resultantes. Repete-se esse processo até que as temperaturas entre essas duas zonas sejam quase idênticas, ou seja, com um erro menor que 1%.

### 3.2.2 Transferência de calor a 1D usando fatores de forma

A transferência de calor a 1D com circuito elétrico equivalente é uma abordagem direta, porém é também mais propícia ao erro, pois despreza os efeitos 3D da transferência de calor. Por exemplo, devido à baixa condutibilidade térmica do ar, é certo que a maior parte do calor que provém do substrato de alumina através da secção 1,3 e 5 da Figura 3.1 irá ser canalizado pelos caminhos 2 e 4 em vez de atravessar o ar para atingir a parte oposta do módulo. Para perceber melhor esse efeito, pode-se observar a Figura 3.4 e a Figura 3.5, que representam a vista frontal e lateral do substrato da alumina.

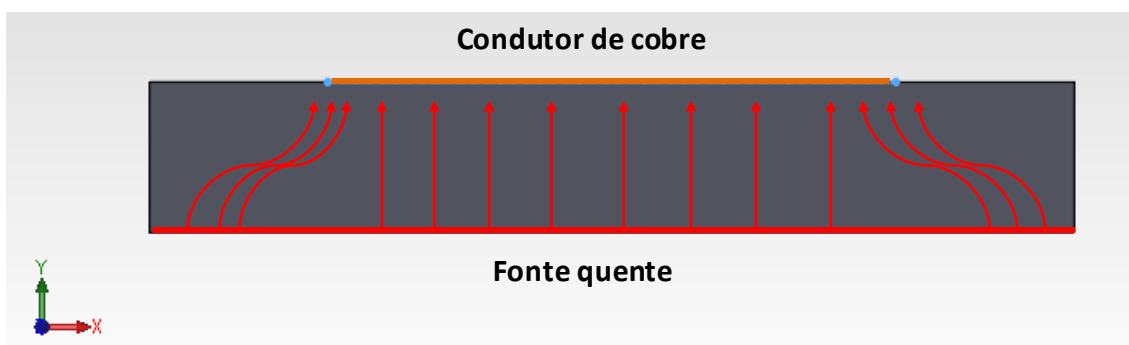


Figura 3.4 – Ilustração dos efeitos 3D da transferência de calor através do substrato de Alumina (vista da frente).

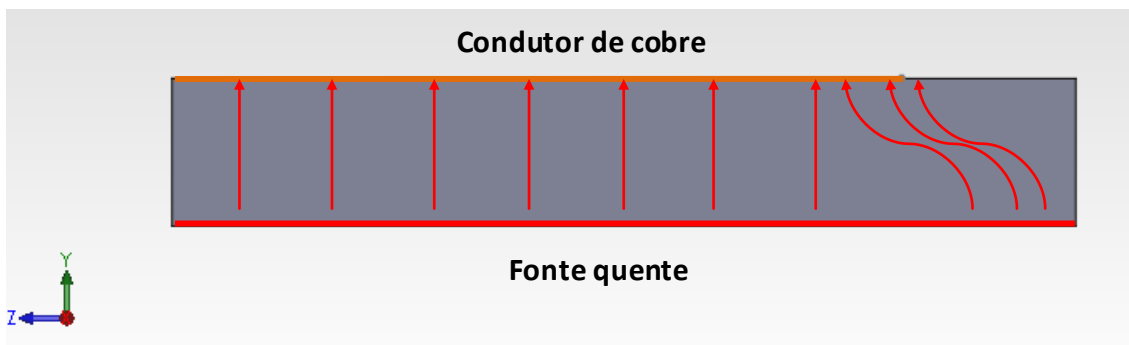


Figura 3.5 - Ilustração dos efeitos 3D da transferência de calor através do substrato de Alumina (vista da direita).

A linha vermelha representa a face quente na cerâmica e a linha laranja a interface de contacto alumina-cobre. Pode-se ver que não existe uma relação constante de secção e espessura. Desta maneira o fluxo de calor (setas a vermelho) vai-se desviar ligeiramente para o caminho de menor resistência, ou seja, para o metal condutor que tem uma grande condutibilidade térmica. Do mesmo como, a maior parte do calor atingindo o metal condutor pelo caminho 2, vai se desviar para caminho 4. Este fenómeno não é tido em conta na transferência de calor a 1D com

circuito elétrico equivalente, especialmente quando secções e espessuras atravessadas pelo fluxo de calor, variam muito através de um determinado objeto.

Os fatores de forma,  $S$ , que na realidade corresponde á relação entre área de secção e espessura equivalente para uma dada geometria, pode ser usado para esses casos para calcular a resistência térmica por condução de uma forma semelhante à da Eq. 3.3:

$$R_{T\_Material} = \frac{1}{S * k} \quad ; \quad S = \left(\frac{A}{L}\right)_{eq} \quad \text{Eq. 3.11}$$

Existem expressões de cálculo analítico do fator de forma para um determinado número de geometrias. Porém é possível calcular para geometrias personalizadas através de sistemas computacionais como o *ANSYS CFX*. Este processo foi usado, para os casos do substrato de alumina e o condutor metálico. Antes de realizar as simulações para determinar os fatores de forma, optou-se por desenhar as duas geometrias no *software SolidWorks* por ser mais acessível de manusear. Na Figura 3.6 e Figura 3.7 pode-se ver as geometrias da alumina e do cobre que irão servir para calcular os seus respetivos fatores de forma.

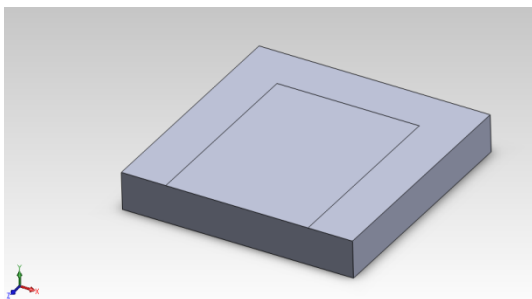


Figura 3.6 – Geometria do substrato de alumina desenhado no *SolidWorks*. Evidenciado a fronteira da interface com o cobre.

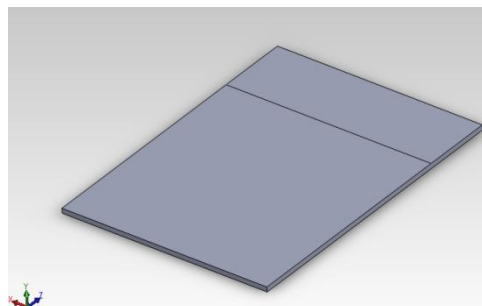


Figura 3.7 - Geometria do metal condutor (cobre) desenhado no *SolidWorks*. Evidenciado a fronteira da interface com o material termoeletrico.

Depois de concluir o desenho das mesmas, importa-se as peças para o *ANSYS CFX*. O processo consistiu em impor uma diferença de temperatura nas superfícies da fonte quente e fria do material em questão, calculando o fluxo de calor resultante. As restantes faces são isoladas termicamente. A potência térmica obtém-se ao fazer o produto entre o fluxo de calor médio e a área de secção (Eq. 3.12). Este cálculo pode ser feito tanto na superfície da face quente como da fria, pois a potência térmica resultante terá que ser igual em ambas.

$$\dot{Q} = \dot{q}_{med} * A \quad \text{Eq. 3.12}$$

Os fatores de forma podem ser calculados facilmente ao substituir a Eq. 3.11 na Eq. 3.1 e reorganizando as mesmas:

$$S = \frac{\dot{Q}}{\Delta T * k} \quad \text{Eq. 3.13}$$

Na Figura 3.8 e Figura 3.9 pode-se observar o contorno do fluxo de calor na face quente e face fria do substrato da alumina e na Figura 3.10 e Figura 3.11 o mesmo caso para o condutor metálico de cobre.

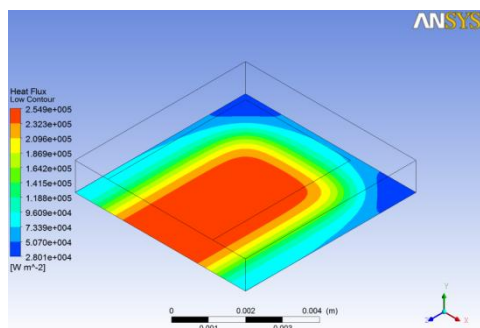


Figura 3.8 - Geometria de alumina usado para calcular o fator de forma, com o contorno do comportamento do fluxo de calor na interface da face quente (ANSYS CFX)

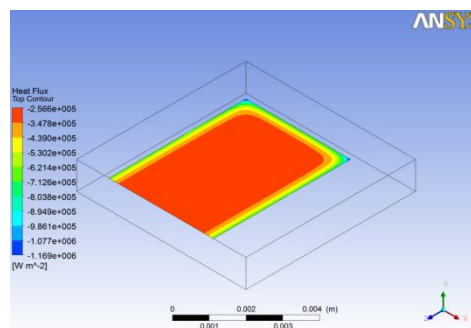


Figura 3.9 - Geometria de alumina usado para calcular o fator de forma, com o contorno do comportamento do fluxo de calor na interface da face fria (ANSYS CFX)

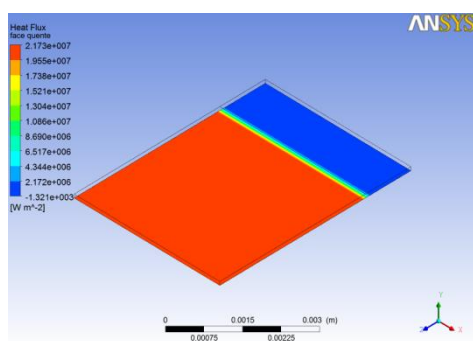


Figura 3.10 - Geometria do cobre usado para calcular o fator de forma, com o contorno do comportamento do fluxo de calor na interface da face quente (ANSYS CFX)

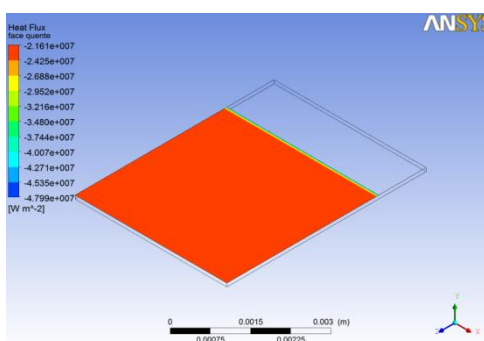


Figura 3.11 - Geometria de cobre usado para calcular o fator de forma, com o contorno do comportamento do fluxo de calor na interface da face fria (ANSYS CFX)

Dado que é um factor geométrico, o fator de forma só é valido para uma dada geometria e em termos práticos, não varia com temperatura (existe uma mínima variação por causa da dependência da condutibilidade térmica perante a temperatura). Tirando o facto de que na maioria dos casos necessita-se de meios computacionais para obter os fatores de forma, os cálculos que usam neste método são na realidade mais simples que o transferência de calor a 1D descrito anteriormente. Os fatores de forma considera implicitamente que o calor irá ser todo canalizado através dos sólidos. Assim, a resistência térmica total vai ser simplesmente a soma de todas as resistências térmicas por condução de cada material e as resistências de contacto. É fundamental referir que uso de fatores de forma somente é possível simular o modelo em condições de isolado termicamente, pois não há calor a passar pelo ar. Mesmo assim, é provável que irá promover bons resultados e mais acertados pelo razão de considerar os efeitos de condução térmica a 3D nos sólidos sem exigir muito em termos computacionais.

### 3.2.3 Modelação térmica detalhada no *ANSYS CFX*;

Simular a transferência de calor de todo o sistema num simulador computacional como o *ANSYS CFX* para obter o perfil de temperaturas e a potência térmica continua a ser um método mais exato que o descrito anteriormente. Uma ferramenta dessas resolve a equação de energia generalizada localmente em todo domínio 3D. Ao contrário dos modelos a 1D, as temperaturas e propriedades podem variar localmente. Porém, estes modelos são mais exigentes computacionalmente e exigem licenças de software mais dispendiosas do que as de folhas de cálculo.

Esta abordagem foi usada somente para calcular um pequeno número de casos com o objetivo de validar os modelos mais simples que foram acima mencionados ou em situações no qual se achou insuficiente para permitir simular fenómenos como a transferência de calor através do ar. Antes de se impor sequer as condições de fronteira, é fundamental criar a malha correta. A Figura 3.12, demonstra um exemplo de uma malha criada para uma simulação.



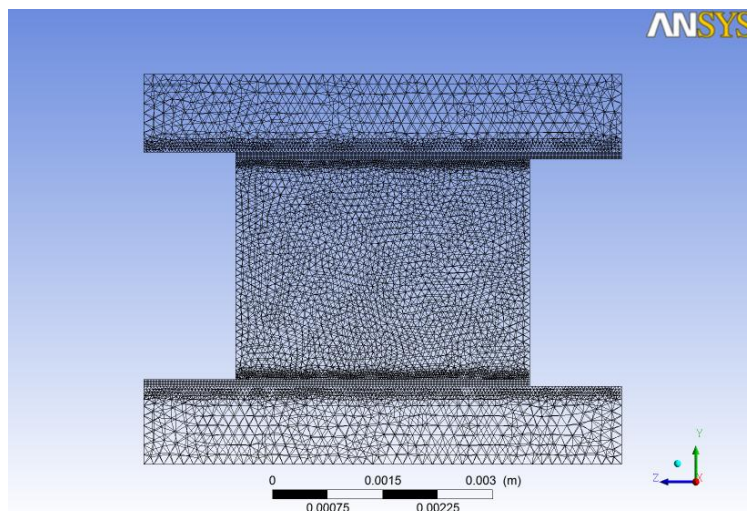
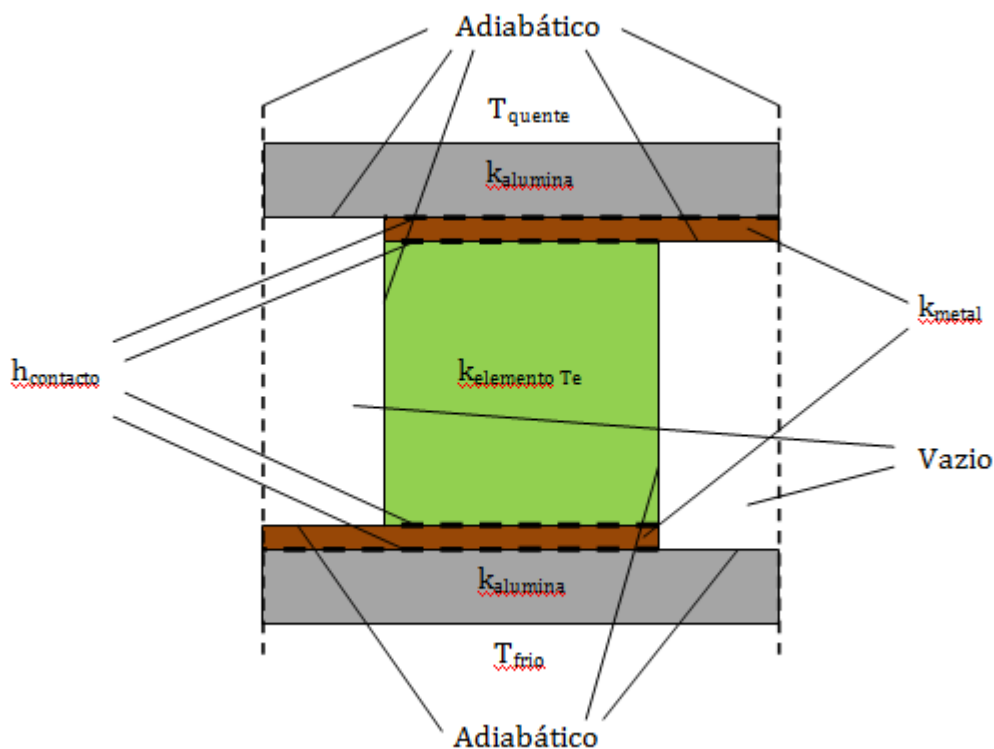
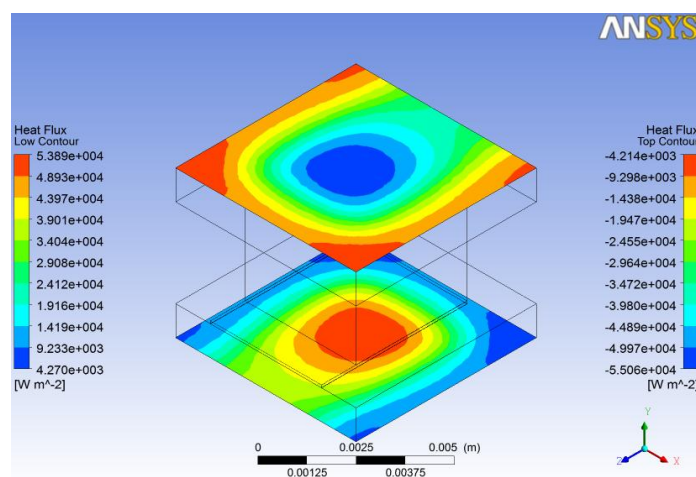


Figura 3.12 – Malha criada para as simulações realizadas no *ANSYS CFX*

Olhando para a figura acima, pode-se observar que nas zonas de interface dos materiais existe uma maior concentração de nós. Isto deve-se acima de tudo por se ter imposto um refinamento da malha nessas zonas. O objetivo desta operação é garantir boas condições da transferência de calor nas interfaces de contacto de forma a se poder investigar com maior incidência os efeitos da resistência de contacto. Tendo sido feita a malha, é então possível inserir todas as propriedades dos materiais e impor as condições de fronteira no software. A Figura 3.13 mostra as condições de fronteira impostas no *ANSYS CFX*. Nesta fase insere-se as condutividades térmicas a variar com a temperatura dos materiais. Após isso, define-se as condições de fronteira do modelo térmico. Impõem-se as temperaturas da face quente e da face fria e isola-se termicamente o resto das faces em contacto com o exterior e os planos de simetria com elementos contínuos. Por último, as interfaces de contacto são definidas pela coeficiente de transferência de calor de contacto.


 Figura 3.13 – Propriedades e condições de fronteira impostas nas simulações do *ANSYS CFX*

Tendo sido imposto tudo isto, é então altura para mandar o *software* correr a simulação. A Figura 3.14 ilustra o fluxo de calor nas faces externas do módulo. O fluxo de calor não é uniforme devido a influência do condutor metálico e do elemento termoeétrico localizado na face oposta. De facto, existe uma maior concentração de fluxo de calor no centro, onde está localizado o telureto de bismuto e o condutor metálico (cobre).


 Figura 3.14 - Resultados do *ANSYS CFX* acerca do comportamento do fluxo de calor na face quente e fria da célula

Quando se vai solicitar ao *ANSYS CFX* um tipo de resultados (por exemplo: do tipo fluxo de calor) é necessário escolher a opção '*area average*' que significa média da área, ou seja, vai calcular por exemplo o fluxo de calor médio por uma dada área. Esta ferramenta não devolve potências térmicas, mas apenas fluxos de calor. Por isso, para se obter o resultado da potência térmica, é necessário mandar calcular o fluxo de calor médio que atravessa uma dada secção e posteriormente multiplicar por essa secção de transferência de calor.

### 3.3 Modelo elétrico

Todos os três métodos que foram referidos até agora, tinham como objetivo simular somente condições e comportamentos térmicos do TEG para se obter, posteriormente, estimativas de resistências e potências térmicas e perfil de temperaturas. Uma vez obtidos esses valores, é possível então servir-se deles como inputs para o modelo elétrico para calcular o comportamento elétrico do TEG a trabalhar como gerador. O comportamento elétrico de um gerador termoeletrónico (TEG) é especialmente caracterizado pela resistência interna elétrica ( $R_i$ ), os coeficientes de *Seebeck* dos elementos P e N ( $\alpha_p$  and  $\alpha_n$ ), a tensão em aberto ( $T_o$ ), e na existência de uma carga, a sua resistência elétrica (neste trabalho considerada igual à resistência interna), a tensão de carga ( $T_c$ ), a corrente ( $I$ ) e a potência elétrica gerada ( $P_e$ ). Evidentemente, o objetivo de um dispositivo termoeletrónico é maximizar a potência elétrica de saída, que em termos de variáveis se denomina por Potência elétrica máxima ( $P_{max}$ ). Para esse caso, necessita-se principalmente de valores de  $T_c$ ,  $I_{max}$  e  $P_{e\_Max}$  para se poder determinar a Potência máxima do módulo.

De forma, a se poder calcular a resistência interna elétrica do módulo é necessário determinar os componentes que a compõem. A resistência interna elétrica de uma junção é constituída por quatro elementos resistivos, as resistências dos elementos termoeletrónicos do tipo-P e do tipo-N, a resistência do condutor metálico que os une e as resistências elétricas de contacto entre o telureto de bismuto e o condutor metálico, conforme demonstrado na Figura 3.15. O valor da resistência interna elétrica total do módulo será o produto entre o valor da resistência interna da junção e numero de junções existentes ( $N_{Junções}$ ):

$$R_{i\_Total} = N_{Junções} * (2 * R_{elemento\_Te} + 2 * R_{Metal} + 4 * R_{E\_Contacto}) \quad \text{Eq. 3.14}$$

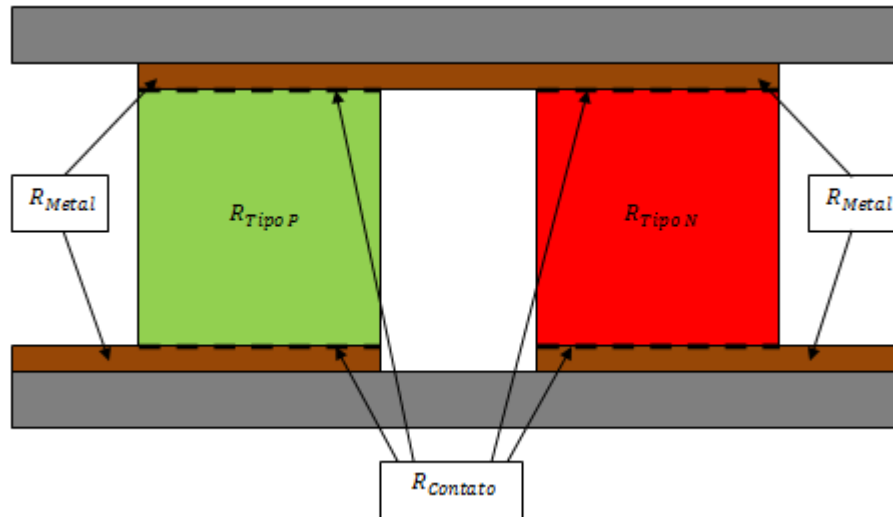


Figura 3.15 - Representação das resistências eléctricas da junção de um TEG

Olhando para a Figura 3.15, pode-se observar que existem, essencialmente, três elementos resistivos relacionados com os materiais, os dois materiais termoeletrónicos e as placas de cobre. A resistência eléctrica de qualquer condutor sólido pode ser calculado simplifadamente a partir da sua resistividade eléctrica ( $\rho$ ), área de secção ( $A$ ) e comprimento ( $L$ ) por onde a corrente passa:

$$R_{E\_Material} = \frac{\rho_{Material} * L}{A} \quad \text{Eq. 3.15}$$

Pensando a determinação da resistência eléctrica da junção passo a passo, inicia-se então pela análise dos elementos termoeletrónicos, passando depois para o metal condutor, segundo a Figura 3.16

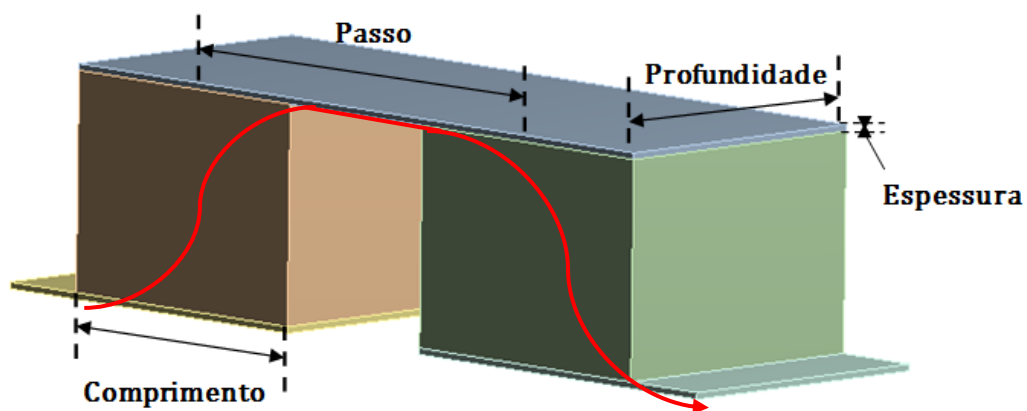


Figura 3.16 – Dimensões do condutor metálico (cobre) com a representação do caminho que a corrente percorre.

Olhando para a Figura 3.16, observa-se as dimensões para o material do tipo N. Logo, a expressão que traduz a resistência elétrica deste material será:

$$R_{elemento\_TE} = \rho_{elemento\_TE} * \frac{Espessura}{Profundidade * Comprimento} \quad \text{Eq. 3.16}$$

Em relação à resistência elétrica do condutor metálico, é necessário ter em atenção não só as propriedades físicas mas a distância média que a corrente percorre ao longo de cada placa de cobre. Tendo em conta os efeitos 3D do fluxo de corrente, é comum utilizar o passo dos elementos termoeletrônicos ( a distância média entre eles) como valor indicativo desta grandeza. Olhando para a Figura 3.16, pelo passo consegue-se fazer uma melhor aproximação da distância que a corrente percorre. Conhecendo o passo, as restantes propriedades físicas e a resistividade do condutor metálico, é possível determinar a sua resistência elétrica.

$$R_{Metal} = \rho_{Metal} * \frac{Passo}{Profundidade * Espessura} \quad \text{Eq. 3.17}$$

A resistividade elétrica é uma propriedade que varia com a temperatura, porém em todos os métodos usou-se uma resistividade constante para uma temperatura média devido a dados não oferecidos pelo fabricante dos módulos termoeletrônicos. Os efeitos 3D do fluxo de corrente também não foram incluídos na maioria dos métodos, exceto no *ANSYS-TE*. Esses efeitos aumentam quando o comprimento do sólido em questão é pequeno, comparando com outras dimensões. A resistência de contacto elétrica das interfaces, considera-se que não varia com a temperatura e cada junção contém quatro ( metal – tipo P e metal – tipo N ). A expressão que traduz o cálculo da resistência de contacto é:

$$R_{E\_Contacto} = \frac{\rho_c}{A} \quad \text{Eq. 3.18}$$

Em que,  $\rho_c$ , representa a resistividade elétrica de contacto e A a área da interface que para os casos em questão é sempre a mesma. Tendo a diferença de temperatura nas faces dos elementos termoeletrônicos a partir do modelo térmico, é possível então calcular a tensão em aberto, pela Eq. 3.19, que deriva da Eq. 2.2:

$$V_0 = N_{Junções} * (\alpha_p - \alpha_n) * (T_{quente\_TE} - T_{frio\_TE}) \quad \text{Eq. 3.19}$$

Sendo  $T_{quente\_TE}$  e  $T_{frio\_TE}$  as temperaturas nas faces quente e frio do material TE.

Com a inclusão de uma carga ( $R_{carga}$ ) no gerador termoeletrico fecha-se o circuito, para obter o efeito termoeletrico. Induz-se uma corrente e a tensão nos terminais do TEG caem para a chamada Tensão em carga ( $V_{carga}$ ), pois parte da tensão gerada ( $V_0$ ) baixa no módulo em si devido à sua resistência interna. A tensão em carga pode ser calculada através da seguinte expressão:

$$V_{carga} = \frac{R_{carga} * V_0}{(R_{carga} + R_{i\_Total})} \quad \text{Eq. 3.20}$$

Tendo, a tensão em aberto e em carga é possível então calcular a potência e a corrente em carga do TEG, pela seguinte forma:

$$P_E = \frac{R_{carga} * V_0^2}{(R_{carga} + R_{i\_Total})^2} \quad \text{Eq. 3.21}$$

$$I = \frac{V_0}{(R_{carga} + R_{i\_Total})} \quad \text{Eq. 3.22}$$

De forma a se obter a potência elétrica máxima no módulo, de acordo com o teorema da potência máxima transferida, esta é máxima quando a resistência da carga é igual à resistência interna do gerador termoeletrico. Para os três métodos de cálculo que foram referidos anteriormente no subcapítulo ‘Modelação térmica’, tomou-se em conta simplesmente o cálculo da potência máxima, considerando-se que existe um dispositivo UPPT que permite ao sistema funcionar nestas condições:

$$P_{E\_Max} = \frac{V_0^2}{4 * R_{i\_Total}} \quad \text{Eq. 3.23}$$

$$I_{Max} = \frac{V_0}{2 * R_{i\_Total}} \quad \text{Eq. 3.24}$$

### 3.3.1 Modelação térmica e elétrica em *MATLAB*

O modelo implementado pelo grupo em ambiente *MATLAB* tem como pressuposto adicionar mais uma abordagem para o modelo térmico e elétrico ao sistema. O método de cálculo *MATLAB* não foi feito de raiz, tendo sido adaptado para a situação em questão a partir de um modelo feito pelo grupo de trabalho (ver apêndice). Este modelo foi desenvolvido para o gerador termoeletrónico existente no laboratório de mecânica da Universidade do Minho.

Até agora, nos métodos de cálculo que foram referidos até aqui, considerou-se que a potência térmica é constante ao longo das interfaces, no caso em que percorre o caminho 4 da Figura 3.1, ou seja, quando atravessa por todas as interfaces existentes no módulo. Mas na realidade não se verifica isso, pois estão presentes os efeitos *Joule* e *Peltier* como ilustrado na Figura 3.17.

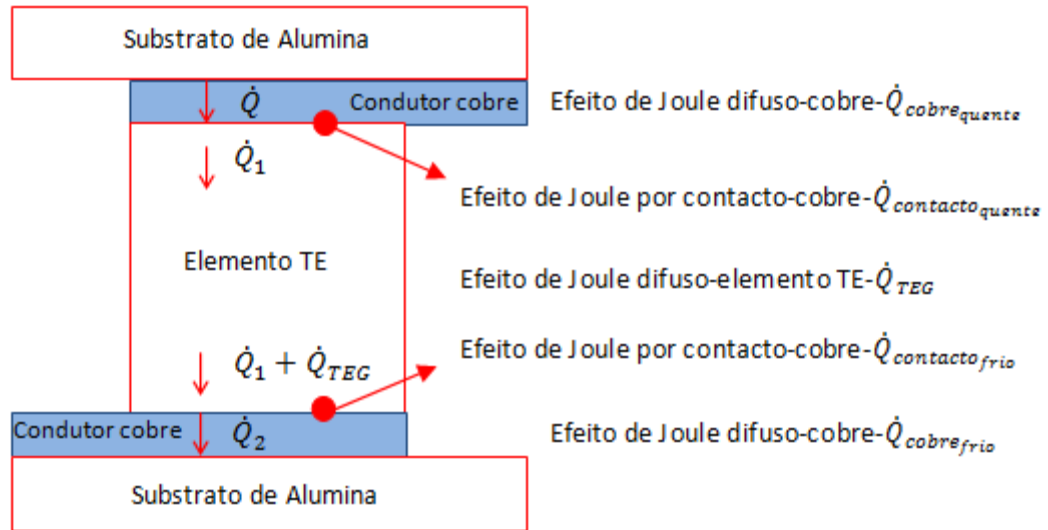


Figura 3.17 – Esquema da célula acerca dos diversos tipos de calor a ter em conta no *MATLAB*

Olhando para a Figura 3.17, o fluxo de calor ( $\dot{Q}$ ) atravessa o substrato de alumina e o metal condutor. Quando o mesmo chegar à face quente do material termoeletrónico, dá-se o efeito *Peltier* e a absorção de calor ( $\dot{Q}_{peltier_{hot}}$ ). O restante fluxo de calor ( $\dot{Q}_1$ ) atravessa o material termoeletrónico e, como aconteceu na face quente, ao chegar à face fria, recebe um ganho de calor ( $\dot{Q}_{peltier_{cold}}$ ) pelo efeito *Peltier* resultando do fluxo de calor de saída ( $\dot{Q}_2$ ). O  $\dot{Q}_2$  representa uma quantidade inferior ao de fluxo de calor de entrada ( $\dot{Q}$ ), porém essa diferença é mínima. Ao longo do caminho que o fluxo de calor atravessa, representado na mesma figura, também se dá a produção de calor por efeito de *Joule* nos dois metais condutores e no material termoeletrónico.

Não esquecendo que o efeito *Joule* também é gerado nas interfaces de contacto metal-material TE. Este caso refere-se à existência corrente e resistência de carga elétrica para a produção dos efeitos *Peltier* e *Joule*. Porém também é possível pôr o programa a correr sem carga o que eliminará estes efeitos. O modelo térmico do *MATLAB* tem como base a transferência de calor usando fatores de forma. Logo, em aberto, os resultados deverão ser iguais para os dois métodos. Este problema de transferência de calor não pode ser corretamente simulado usando a analogia do circuito elétrico equivalente devido à existência de fontes de calor difusas.

O gerador simulado, é constituído por 12 módulos, logo os resultados vão se apresentar para essa quantidade de módulos. Para analisar os módulos existentes (designados por *RS*), teve que se modificar as tabelas de propriedades dos materiais. Os resultados são apresentados através de uma exportação para uma folha de *Excel*. De forma a que a comparação de resultados com os outros métodos de cálculo referidos no presente trabalho fosse mais acessível. Adicionou-se aos outputs o valor de cada uma das resistências térmicas das diversas interfaces do módulo na folha de *Excel*. Após se ter dado 20 iterações, foi então possível comparar temperaturas e resistências nas interfaces, potência térmica e elétrica e resistência interna elétrica.

### 3.3.2 Análise termoeletrica através do *ANSYS Thermal-electric*

Esta última abordagem é a mais completa e exata usada no presente trabalho para a simulação de TEG's. Basicamente, esta ferramenta vai servir para validar todos os resultados originados pelos outros métodos. Neste método, usou-se o *software ANSYS Workbench* versão 12, que contém o pacote *Thermal-Electric (ANSYS TE)*. Este instrumento é do tipo *Multiphysics* permitindo simular localmente os efeitos térmicos e elétricos, incluindo a geração/absorção de calor devido ao efeito *Joule*, *Peltier* e *Thomson* e, naturalmente, o efeito *Seebeck*.

Na presente análise, uma junção completa foi importada a partir da ferramenta CAD *Solidworks* para o *ANSYS TE*. Adicionou-se à base de dados as propriedades dependentes da temperatura dos materiais como, por exemplo, a condutibilidade térmica. Foram também incluídas propriedades termoeletricas como os coeficientes de *Seebeck*. Para uma simulação mais exata, foram definidas as condutâncias térmicas e elétricas de contacto. As condições de fronteira deste modelo estão ilustradas na Figura 3.18. A carga foi simulada utilizando um bloco de material fictício cuja resistividade e dimensões produzissem a resistência de carga pretendida.



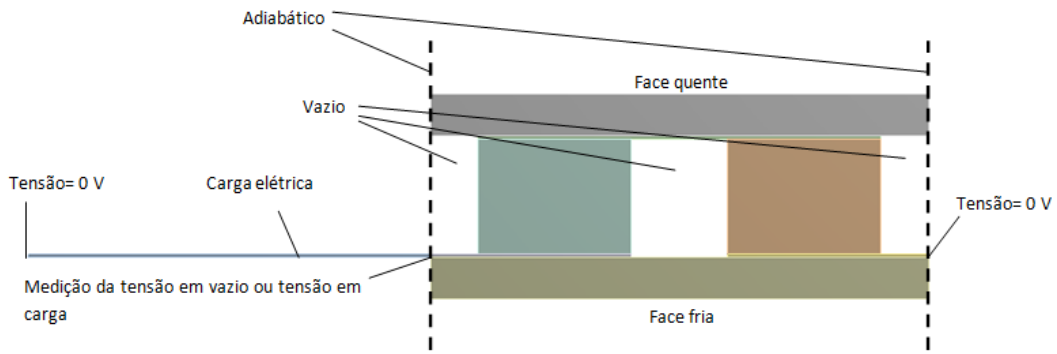


Figura 3.18 - Definição das condições de fronteira no ANSYS TE.

No substrato superior da alumina definiu-se o  $T_{\text{Quente}}$  e no substrato inferior a  $T_{\text{Frio}}$ , nas restantes faces que limitam o domínio estão como termicamente isoladas (simetria com junções adjacentes). Na parte elétrica, de forma a se originar uma corrente no módulo, impôs-se uma tensão de referência (0 Volts) na extremidade da carga e na extremidade do condutor metálico. Posto desta maneira permite no final da simulação, medir a tensão na outra extremidade do condutor metálico oposto que não é nada mais e nada menos que tensão em carga (Figura 3.18). No mesmo sitio, retirando a carga do modelo, pode-se medir a tensão em aberto. Para calcular a potência máxima, o procedimento que se optou, foi realizar uma primeira simulação sem carga para obter a respetiva tensão em vazio para cada caso (para cada diferença de temperatura). De seguida, calculando uma outra simulação com a resistência de carga e media-se a tensão em carga e calculava-se a resistência interna do módulo pela Eq. 3.20, reorganizando a mesma:

$$R_{i\_Total} = R_{Carga} * \left( \frac{V_0}{V_{Carga}} - 1 \right) \quad \text{Eq. 3.25}$$

Ao adicionar a carga na simulação é fundamental definir corretamente a sua resistividade e dimensões de forma a que a sua resistência seja igual à resistência interna do módulo. Se realmente se verificar esta condição, é então possível calcular a potência máxima elétrica pela Eq. 3.21.



## 4. Caraterização dos módulos e os seus Parâmetros de entrada

---

## 4 CARACTERIZAÇÃO DOS MÓDULOS E OS SEUS PARAMETROS DE ENTRADA

### 4.1 Introdução

Este capítulo apresenta os parâmetros de entrada usados nos diversos métodos de cálculo criados para este estudo. Numa primeira parte são descritos os parâmetros *standard* do módulo termoeétrico e numa fase seguinte vai se fazer a relação das diversas variáveis intervenientes no funcionamento destes dispositivos como temperaturas de entrada, propriedades e dimensões dos materiais. Esta análise permite para a fase posterior, os resultados, determinar e avaliar com mais eficácia o comportamento e desempenho dos módulos termoeétricos às diversas solicitações.

### 4.2 Caraterização dos módulos

Neste subcapítulo apresenta-se a caraterização dos módulos termoeétricos utilizados para o presente trabalho. Os módulos adotados foram os da *RS Componentes*, com a referência *6937116*. Mais especificamente, são fabricados pela *European Thermodynamics (ETDYN)* sob a referência GM250-49-45-25 [28] [29].

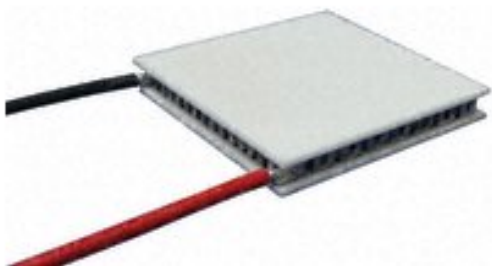


Figura 4.1 – Módulos termoeétrico

*RS 6937116* [28].

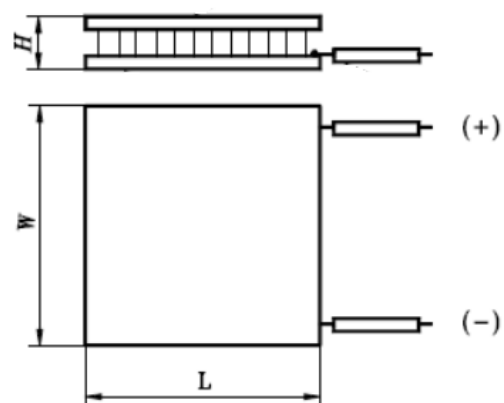


Figura 4.2 – Esquema dos módulos termoeétricos

*RS 6937116* [29].

Na Figura 4.1 pode-se observar os módulos que foram utilizados para o presente trabalho. Na Figura 4.2 vê-se o esquema das dimensões dos módulos termoeétricos. A seguir, apresenta-se a Tabela 1 com algumas características deste dispositivo fornecidas pelo fabricante.

Tabela 1 - Características dos módulos termoeétricos para as temperaturas de face quente e fria de 250 e 50°C [29].

	$N_{\text{junções}}$	$V_{\text{max}}$ (V)	$R_{\text{int}}$ ( $\Omega$ )	$I_{\text{max}}$ (A)	$P_{E\_max}$ (W)	$T_{\text{max}}$ (°C)	W (mm)	L (mm)	H (mm)
<b>RS 6937116</b>	49	3.6	0.27	6.67	12.20	250	62	62	5.3

Em que W, L e H representa a largura, comprimento e altura dos módulos *RS 6937116*. Os valores na Tabela 1 foram obtidos em testes feitos pelo fabricante, em que se colocavam a face quente a 250°C e face fria a 50°C. Para além da tabela, o fabricante fornece também os gráficos que irão ser apresentados a seguir, que demonstra o desempenho dos módulos para uma gama de temperaturas. O Figura 4.3 apresenta a tensão em vazio e o Figura 4.4 a potência elétrica, com uma carga de resistência semelhante à resistência interna do módulo. Ambos estes gráficos são em função da diferença de temperatura entre as faces (para quatro temperaturas na face fria, 30, 60, 80 e 100°C).

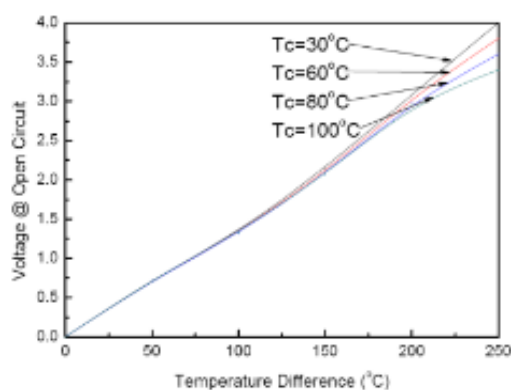


Figura 4.3 – Tensão em vazio em função da diferença de temperatura entre as faces dos módulos *RS* [29].

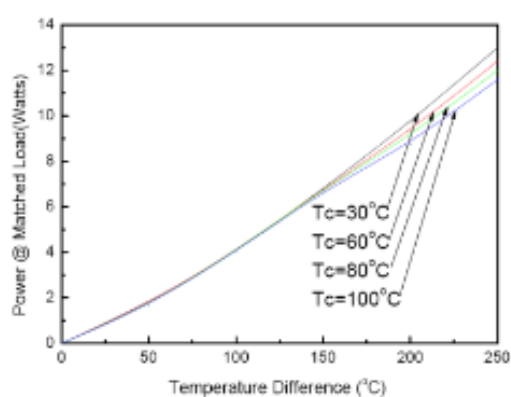


Figura 4.4 – Potência em função da diferença de temperatura entre as faces dos módulos *RS* [29].

Olhando para os dois gráficos, observa-se que as curvas de tensão e potência começam a divergir para uma diferença de temperatura acima dos 200°C. Isto deve-se ao facto de que para essas temperaturas existe uma alteração do coeficiente de *Seebeck* médio dos materiais, que é máximo para valores próximos de temperatura de ambiente. Porém na Figura 4.4 pode dever-se também a uma dependência da resistividade elétrica com a temperatura. Pois, segundo a Eq. 3.23, o quadrado da tensão deveria causar diferenças maiores na potência elétrica, o que não acontece. Logo, é bem provável que a resistividade elétrica tenha uma tendência contrária. A essas temperaturas consegue-se obter valores de tensão na ordem dos 2.5 a 3V, e valores de potência elétrica entre os 9 e os 10W.

### 4.3 Parâmetros standard dos módulos termoeletrônicos

Antes de se realizar as simulações, é preciso mencionar a constituição dos módulos. No modelo térmico e elétrico, são introduzidos parâmetros conhecidos (*inputs*), sendo calculados, pelos métodos de cálculo que foram referidos no capítulo anterior, todos os restantes parâmetros. Desta forma é possível incrementar ou decrementar um parâmetro do sistema e verificar como variam os restantes parâmetros. Este modelo está calibrado para os módulos *RS 6937116* e as tabelas seguintes mostram quais os parâmetros a introduzir. É importante referir que, este modelo vai estar limitado por não ter em conta a variação da resistividade elétrica, da condutividade térmica dos elementos TE e do coeficiente de *Seebeck* dos materiais com a temperatura, pelo fato de o fabricante não os ter facultado. Logo, para estas propriedades vão-se utilizar valores médios resultantes de pesquisa bibliográfica [4]. As dimensões apresentadas nas tabelas referem-se à discretização do módulo relativamente a um elemento TE com um dado passo (medida que discretiza o módulo a um elemento termoeletrónico), ou seja, metade de uma junção (como está representado na Figura 3.1).

Tabela 2 - Dimensões da alumina (cerâmica) do módulo para uma célula elementar.

Material	Propriedade	Unidade	Valor
Alumina	Passo	m	0.0065
	Espessura	m	0.001
	Área	m <sup>2</sup>	4.2E-05

Como se pode ver na Tabela 2, o passo refere-se à dimensão que discretiza o módulo a uma célula elementar. Se cada célula contém um elemento TE e o módulo é constituído por 49 junções, então a módulo é constituído por 98 células elementares.

Tabela 3 - Dimensões e propriedades do condutor metálico para uma célula elementar [4].

Material	Propriedade	Unidade	Valor
Cobre (condutor elétrico)	Passo	m	0.0065
	Comprimento	m	0.00525
	Profundidade	m	0.004
	Espessura	m	0.00009
	Resistividade	$\Omega.m$	1.80E-08

A Tabela 3 contém para além das dimensões do condutor metálico, a resistividade elétrica do mesmo. A condutividade térmica do cobre é um elemento tabelado em função da temperatura, daí não constar na Tabela 3.

Tabela 4 - Dimensões e propriedades do elemento TE (tipo P) para uma célula elementar [4].

Material	Propriedade	Unidade	Valor
Elemento TE (Tipo P)	Comprimento	m	0.004
	Profundidade	m	0.004
	Espessura	m	0.003
	Secção	m <sup>2</sup>	0.000016
	Resistividade	$\Omega.m$	1.50E-05
	Condutividade térmica	W/m°C	1.2
	Coefficiente <i>Seebeck</i>	V/°C	1.90E-04

Na Tabela 4 observa-se as dimensões do elemento termoeletrónico (tipo P) e também as propriedades elétricas como a resistividade elétrica e o coeficiente de *Seebeck*. A Tabela 4, refere-se ao elemento P, e a Tabela 5 ao outro elemento termoeletrónico (Tipo N). As dimensões entre estes dois elementos são idênticas assim como as propriedades elétricas, porém o coeficiente de *Seebeck* é simétrico entre ambos. As condutividades térmicas também são

apresentados nas duas tabelas, uma vez que, como foi dito anteriormente, não estão a variar com a temperatura.

Tabela 5 - Dimensões e propriedades do elemento TE (tipo N) para uma célula elementar [4].

Material	Propriedade	Unidade	Valor
Elemento TE (Tipo N)	Comprimento	m	0.004
	Profundidade	m	0.004
	Espessura	m	0.003
	Secção	m <sup>2</sup>	0.000016
	Resistividade	$\Omega \cdot m$	1.50E-05
	Condutividade térmica	W/m°C	1.2
	Coeficiente <i>Seebeck</i>	V/°C	-1.90E-04

É fundamental também definir os parâmetros para as interfaces de contacto. Na Tabela 6 apresenta-se as dimensões e propriedades de contacto da interface alumina-cobre. Esta interface repete-se duas vezes em cada célula, uma na parte inferior e outra na parte superior da célula. É de assinalar que o valor escolhido para a condutância térmica de contacto foi baseada, à falta de dados da bibliografia, no valor correspondente a uma interface com pasta térmica ('silicon oil', [4]).

Tabela 6 - Dimensões e propriedades da interface de contacto Alumina-cobre para uma célula elementar [4].

Material	Propriedade	Unidade	Valor
Contacto (Alumina-Cobre)	Profundidade	m	0.004
	Comprimento	m	0.00525
	Área	m <sup>2</sup>	0.000021
	Resistividade	$\Omega \cdot m^2$	6.0E-09
	Condutância térmica	W/m <sup>2</sup> °C	19000

A Tabela 7 contém as dimensões e propriedades da interface cobre-material termoeletrónico. Tal como com a interface alumina-cobre, existem duas destas interfaces por célula elementar, na parte inferior e na parte superior da célula.



Tabela 7 - Dimensões e propriedades da interface de contacto Cobre-elemento TE para uma célula elementar [4].

Material	Propriedade	Unidade	Valor
Contacto (Cobre-Elemento TE)	Profundidade	m	0.004
	Comprimento	m	0.004
	Área	m <sup>2</sup>	0.000016
	Resistividade de contacto	$\Omega \cdot m^2$	6.0E-09
	Condutância térmica de contacto	W/m <sup>2</sup> °C	19000

Por último a Tabela 8 refere-se às dimensões da carga elétrica fictícia que se irá utilizar nas simulações do *ANSYS-TE*. A resistividade elétrica da carga não está incluída na tabela pois esta é ajustada em cada caso de modo a se obter uma resistência de carga coincidente com a resistência interna da célula, o que maximiza a potência produzida.

Tabela 8 - Dimensões da carga que se irá usar nas simulações do *ANSYS-TE*.

Material	Propriedade	Unidade	Valor
Carga	Profundidade	m	0.004
	Comprimento	m	0.00105

#### 4.4 Parâmetros de entrada nas simulações

Depois de apresentados os parâmetros *standard*, apresenta a gama de variação dos parâmetros de entrada que foram usados nos diversos métodos de cálculo referidos no capítulo anterior. Neste trabalho foram realizados vários os estudos com a combinação de vários parâmetros, como se pode observar na Tabela 9.

Tabela 9 – Parâmetros de entrada e a sua gama de variação usada no presente estudo

Variável	Unidade	Standard	Gama de entradas
Temperatura da face quente	°C	-	[150;250]
Temperatura da face fria	°C	-	50
Espessura da Alumina	mm	1.0	[0.5;3.0]
Espessura do Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub>	mm	3.0	[0.5;3.0]
Coeficiente de <i>Seebeck</i> do Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub>	V/°C	1.9E-04 -1.9E-04	Valor Standard
Condutividade térmica do Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub>	W/m°C	1.2 1.2	Valor standard
Resistividade elétrica do Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub>	Ω.m	1.5E-05 1.5E-05	Valor standard
Coeficiente de transferência de calor de contacto	W/m <sup>2</sup> °C	19000	[6600;∞]
Resistividade elétrica de contacto	Ω.m <sup>2</sup>	6.0e-09	[0;1.0E-08]

Como se pode ver pela tabela acima, variar a diferença de temperatura ao longo do módulo foi uma das variáveis ter conta. Mas sabe-se à partida que aumentando a diferença de temperatura, aumenta-se a potência elétrica gerada. Como já foi dito anteriormente, os valores para o coeficiente de *Seebeck*, condutividade térmica e resistividade elétrica do telureto de bismuto mantiveram-se constantes para todas as simulações. A influência das espessuras da alumina e do telureto de bismuto e as suas diversas combinações de propriedades de contacto foi onde principalmente esta investigação se centrou.

## 5. Análise e discussão de Resultados

---

## 5 ANÁLISE E DISCUSSÃO DE RESULTADOS

### 5.1 Introdução

Neste capítulo pretende-se apresentar e discutir os resultados obtidos com os diversos métodos de cálculo referidos no Capítulo 3. Tirar conclusões acerca do comportamento dos módulos conforme se variam algumas variáveis é um dos objetivos desta investigação. Este capítulo está dividido em quatro subcapítulos. O primeiro subcapítulo, intitulado de 'Análise térmica e elétrica do módulo' analisa e estuda os principais parâmetros (por exemplo: espessura do elemento TE, resistências de contacto) que influenciam o desempenho do módulo. No segundo, fazem-se as comparações dos principais parâmetros obtidos pelos vários métodos de cálculo para as mesmas condições. Desta maneira é possível verificar a validade das abordagens de cálculo comparando as diferenças relativas dos resultados. No terceiro subcapítulo, apresentam-se de uma forma sucinta os resultados obtidos, integrando os módulos num gerador termoeletrico, sendo a temperatura da face quente controlado por um *heat pipe* e a face fria arrefecido por um circuito de água fechado. Desta maneira, analisa-se a diferença entre este método e a situação em que simula somente o módulo termoeletrico impondo uma diferença de temperatura nas suas faces. Por último, o quarto subcapítulo, ilustra o comportamento dos módulos nas simulações numéricas mais realistas ( do tipo *Multiphysics*) de modo a se poder observar a influência dos vários fenómenos que neles ocorrem.

### 5.2 Análise térmica e elétrica do módulo

A Figura 5.1 compara as cinco abordagens que se realizaram (transferência de calor a 1D, fatores de forma, *ANSYS CFX*, *MATLAB* e *ANSYS TE*). No mesmo gráfico está representada a máxima potência elétrica ( $P_{max}$ ) em função da diferença de temperatura entre a face quente e face fria do módulo e para três espessuras diferentes de telureto de Bismuto ( $Bi_2Te_3$ ). Pode-se observar que todas as cinco abordagens fornecem resultados semelhantes para as condições standard (a diferença máxima para o método mais realista, *ANSYS TE*, é  $\pm 5\%$ ). Olhando para os resultados de potência elétrica máxima, pode-se observar que a transferência de calor a 1D é o método que apresenta resultados mais afastados em relação ao método mais realista, o *ANSYS TE*. A diferença entre os resultados dos vários métodos aumenta à medida que se diminui a espessura do telureto de Bismuto.

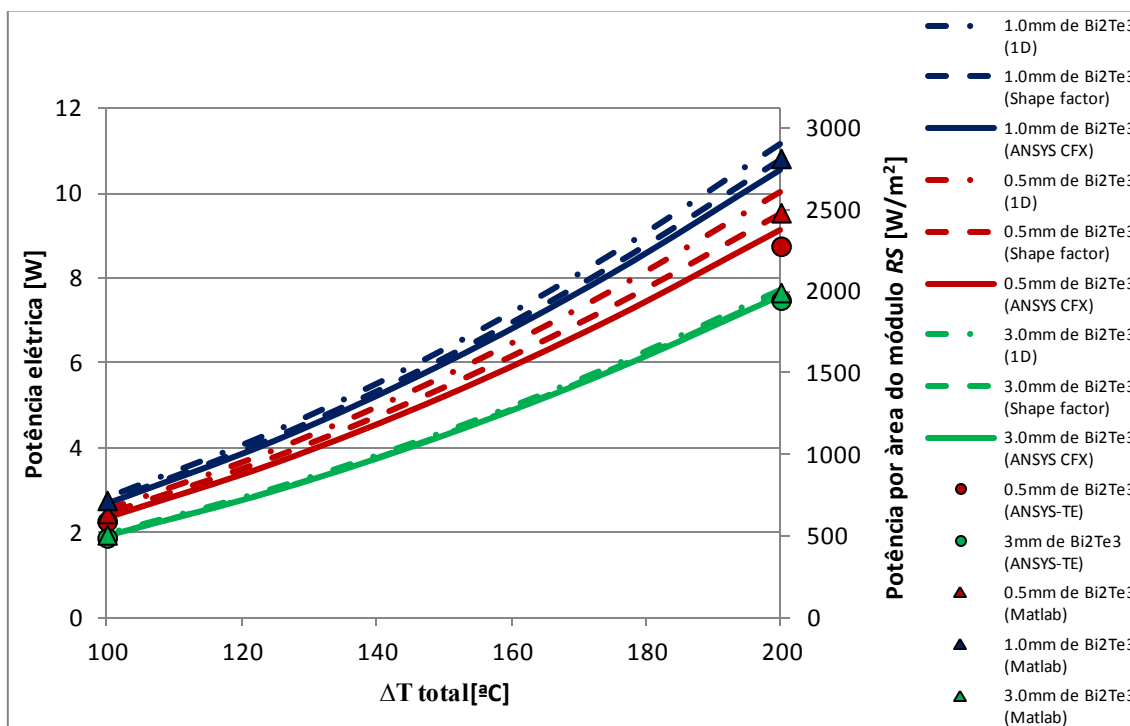


Figura 5.1 – Potência elétrica (esquerda) e potência elétrica por área de módulo (direita) em função da diferença de temperatura, comparando os diversos métodos de cálculo.

Olhando para o mesmo gráfico, pode-se observar que um aumento da temperatura causa naturalmente um aumento da potência elétrica, segundo a Eq. 3.4, devido ao aumento da tensão de *Seebeck* que está ao quadrado. Uma última particularidade que se pode retirar deste gráfico é que a máxima potência elétrica não é obtida para uma espessura mínima ou máxima do telureto de bismuto, mas a um valor intermédio de espessura (1 mm). A influência da espessura do material termoeétrico irá ser analisada em detalhe mais à frente. A Figura 5.2, mostra o perfil de temperatura ao longo dos diferentes substratos/interfaces dos materiais do módulo para uma espessura *standard* de telureto de bismuto (3.0mm). Olhando para o perfil de temperaturas, a maior queda é observada ao longo do  $Bi_2Te_3$ , o que é natural visto ser maior a resistência térmica. A resistência de contacto representa a resistência com a segunda maior queda, porém é muito menor que a anterior. Comparando essas duas últimas resistências com as de alumina e do cobre, estas são quase desprezáveis (1%), surgindo no gráfico, como duas retas quase horizontais. O objetivo principal de aumentar o desempenho dos módulos termoeétricos poderá passar por maximizar a resistência térmica do material termoeétrico, ou seja, aumentar o máximo possível a diferença de temperatura nas faces do telureto de bismuto ao mesmo tempo que se minimiza as restantes resistências, de forma a que a diferença de temperatura ocorra maioritariamente às faces do material termoeétrico.

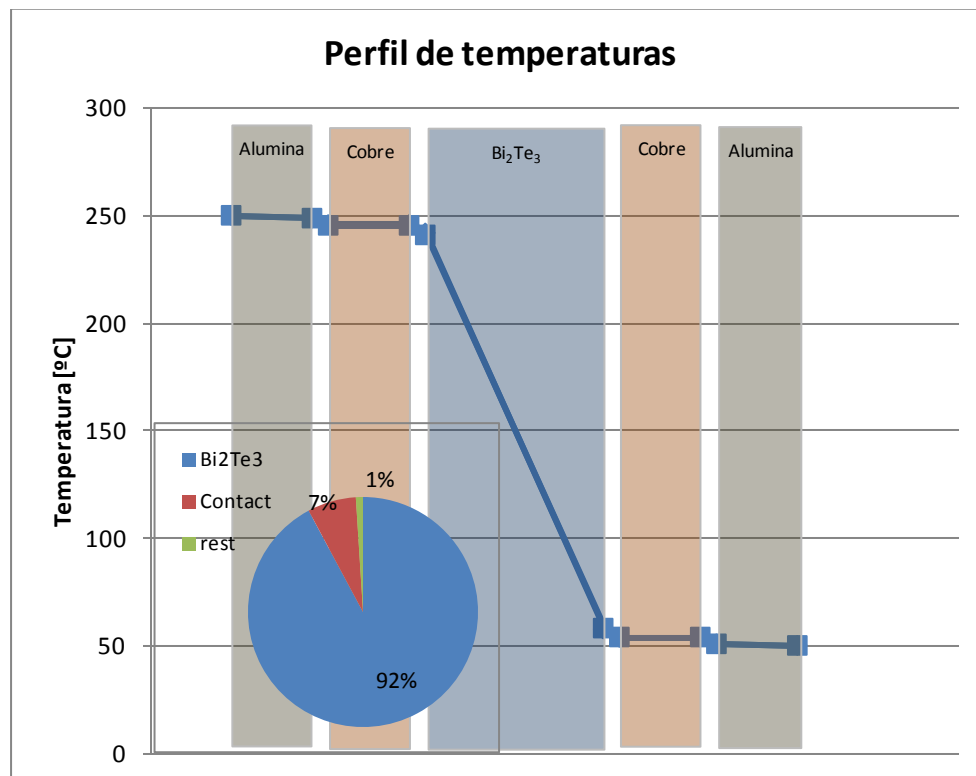


Figura 5.2 – Perfil de temperatura ao longo das interfaces do módulo para condições standard, espessura do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  (3.0mm). Contendo o peso relativo das várias resistências térmicas(fatores de forma).

Reduzindo a espessura do material termoeétrico causa naturalmente uma redução na resistência térmica e, conseqüentemente, na diferença de temperatura às faces do material TE, enquanto a diminuição de temperatura no resto do módulo irá aumentar. A Figura 5.3 mostra esse comportamento, apresentado o perfil de temperaturas (linha vermelha) para uma espessura de 0.5mm de telureto de bismuto. A linha azul fina continua a representar o perfil de temperaturas da Figura 5.2 para efeitos de comparação. Comparando um caso ao outro, observa-se que para uma espessura de 0.5mm existem quedas de temperatura muito mais intensas nas interfaces de contacto, associadas a uma resistência térmica de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  mais baixa. Isto é, a diferença de temperatura nas faces do telureto de bismuto diminui proporcionalmente com a resistência do mesmo, o que vai em conta ao que D.Ebling referiu no seu trabalho [26]. A redução da espessura de 3mm para 0.5mm traduz-se numa queda da diferença de temperatura de 184 para 132°C, ou seja, uma redução de cerca 28% da mesma. Este abaixamento da diferença de temperatura entre as faces do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , causa uma diminuição significativa na tensão originada pelo efeito de *Seebeck* (Eq. 3.19) porém também reduz a resistência interna elétrica, o que é benéfico. Sabendo que a potência elétrica máxima depende dessas duas variáveis e pegando os resultados da Figura 5.1, pode-se dizer que essa variável aumenta com a redução da espessura do material termoeétrico de 3 para 0.5mm. Ou seja, a

diminuição da resistência interna elétrica prevaleceu sobre a diminuição da tensão gerada do efeito de *Seebeck*, aumentando, consequentemente, a potência elétrica ao reduzir a espessura de 3 para 0.5mm.

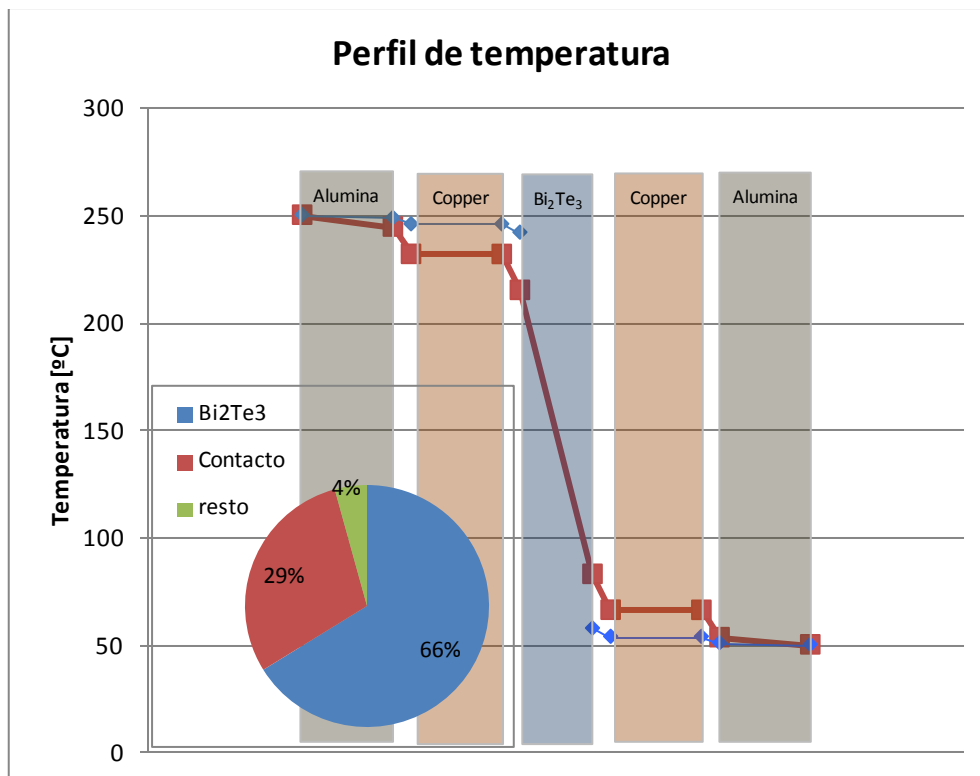


Figura 5.3 – Perfil de temperatura para as espessuras de material TE de 0.5mm (vermelho) e 3.0mm (azul), contendo o peso relativo das várias resistências térmicas para 0.5mm(fatores de forma).

A Figura 5.4 apresenta a potência elétrica máxima em função da espessura do Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> para três espessuras diferentes de alumina (0.5mm, 1mm e 3mm) e para três coeficientes de transferência de calor de contacto ( $h_c$ ) distintos (sem resistência de contacto,  $h_c=\infty$ ; boa resistência de contacto,  $h_c=19000 \text{ W/m}^2\text{K}$ ;  $h_c=6600 \text{ W/m}^2\text{K}$ ). Os últimos dois casos correspondem ao uso de pasta térmica (óleo de silicone) e uma resistência de contacto real fornecida pelo fabricante *Hi-Z* [30]. Em todos os casos representados no gráfico, está fixada a resistividade de contacto elétrica em  $6 \times 10^{-9} \Omega \cdot \text{m}^2$  (standard). Olhando para a Figura 5.4, nota-se a que a diminuição da espessura da alumina causa um aumento da potência elétrica de saída, porém esse efeito é desprezável para baixas resistências de contacto ( $h_c$  altos).

Aumentar o  $h_c$  tem uma influência muito positiva na potência elétrica de saída, porque a perda da diferença de temperatura nas resistências externas ao material termoeétrico vai ser muito menor. Por outro lado, verifica-se que a diminuição da espessura do material TE primeiro aumenta a potência elétrica e depois, a partir de um certo ponto, começa a diminuir a mesma.

Isto tudo deve-se, principalmente a dois efeitos: 1) A redução da espessura do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  causa uma diminuição da resistência térmica e portanto uma menor diferença de temperatura no mesmo, isto faz com que a tensão gerada pelo efeito de *Seebeck* diminua afetando negativamente a potência elétrica.

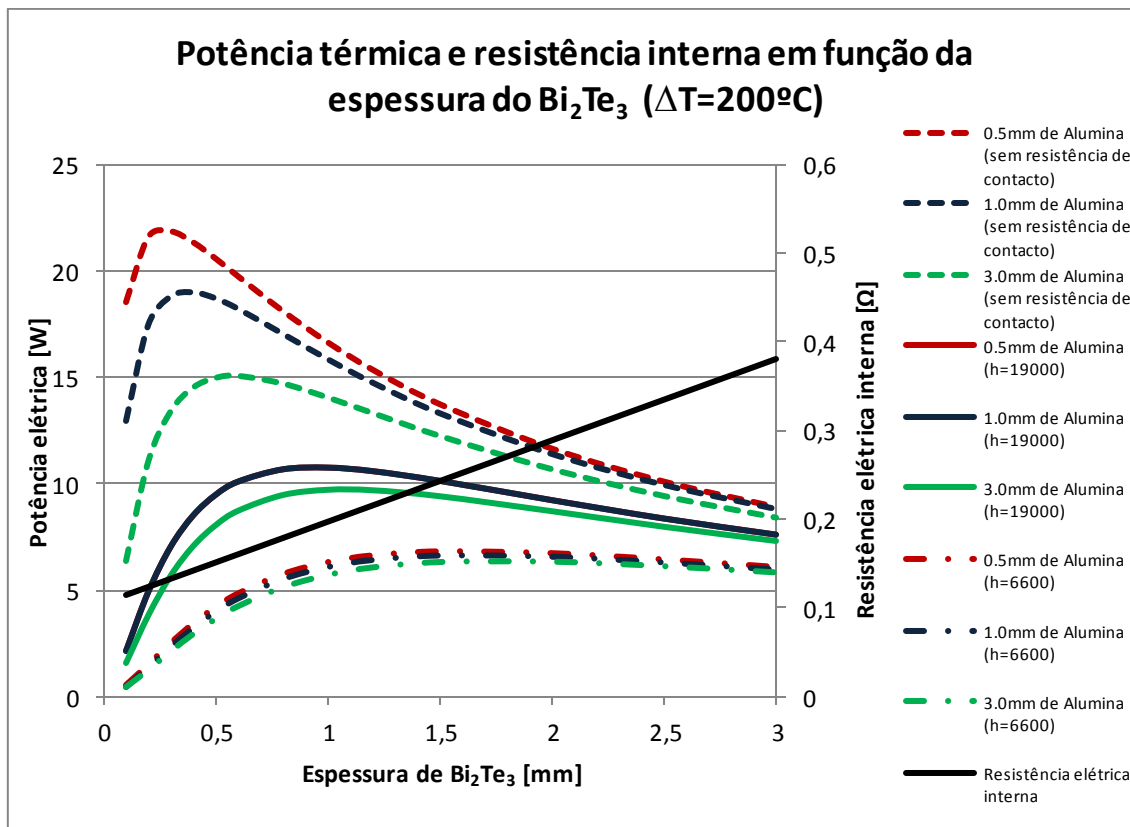


Figura 5.4 – Potência elétrica e resistência elétrica interna em função da espessura do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , para três valores diferentes de espessura de Alumina e de resistências de contacto térmicas ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$  e  $\rho_c=6 \times 10^{-9} \Omega \cdot \text{m}^2$ ) (fatores de forma).

2) Paralelamente uma espessura menor do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  irá provocar uma diminuição da sua resistência elétrica (linha contínua preta) e desta maneira afetando positivamente a potência elétrica pela Eq. 3.23. Combinando estes dois efeitos, provoca a existência de um ponto ótimo onde a potência elétrica é máxima, como se pode evidenciar nas diversas curvas da Figura 5.4. Ora isso sustenta a conclusão de M.Hall ao dizer que o ponto ótimo se encontra dentro de uma gama de espessura do material termoeétrico para uma fração de ocupação dos elementos TE constantes [27]. Depois de se observar que a resistência térmica de contacto tem uma grande influência na potência elétrica de saída, realizou-se o gráfico da Figura 5.5. Nesta figura analisa-se o efeito de  $h_c$  em função da espessura do telureto de bismuto, na potência térmica e elétrica do módulo para uma ampla gama de valores deste parâmetro. Tal como na Figura 5.4, utilizou-se a resistividade elétrica de contacto *standard*,  $6 \times 10^{-9} \Omega \cdot \text{m}^2$ . Na Figura 5.5, pode-se notar que a



espessura ótima, a espessura no qual se atinge o ponto de maior potência, depende muito do coeficiente de transferência de calor de contacto,  $h_c$ . Assim, aumentando  $h_c$  permite não só o aumento da potência elétrica máxima, mas também a redução da espessura ótima do material termoeletrônico do módulo, reduzindo custos com material.

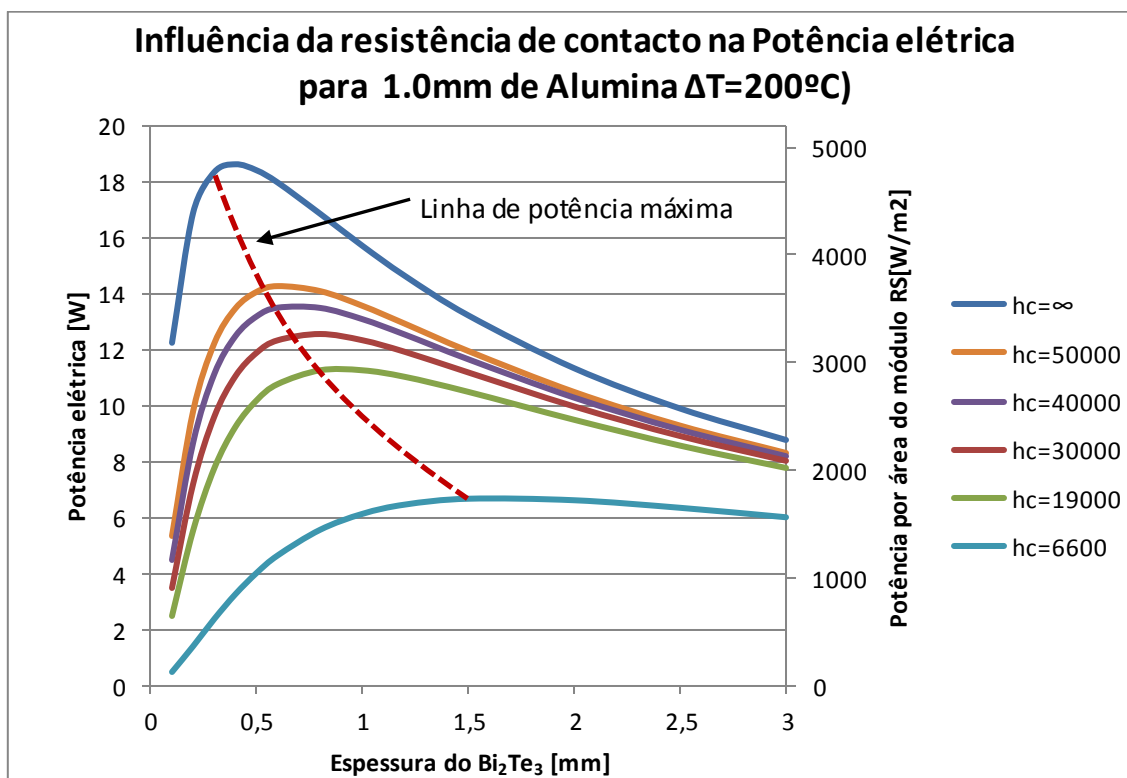


Figura 5.5 – Influência da espessura do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  na Potência elétrica para diferentes valores de coeficientes transferência de calor de contacto ( $h_c$ , em  $\text{W}/\text{m}^2\text{K}$ ), para uma espessura da alumina de 1.0mm e resistividade elétrica de contacto de  $6 \times 10^{-3} \Omega \cdot \text{m}^2$  ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ )(fatores de forma).

A resistividade elétrica de contacto ( $\rho_c$ ) também tem um papel fundamental na potência elétrica máxima. A Figura 5.6 mostra a influência da resistividade elétrica de contacto na potência elétrica máxima em função da espessura do telureto de bismuto e neste caso usou-se  $h_c=19000 \text{ W}/\text{m}^2\text{K}$  (standard). Observa-se, que  $\rho_c$  tem um comportamento muito similar ao de  $h_c$ . À medida que aumenta a resistividade elétrica de contacto, diminui-se a potência elétrica máxima. Assim, ao diminuir o  $\rho_c$ , aumenta-se a máxima potência elétrica e, consequentemente, reduz-se a espessura do material termoeletrônico num módulo para atingir o ponto ótimo.

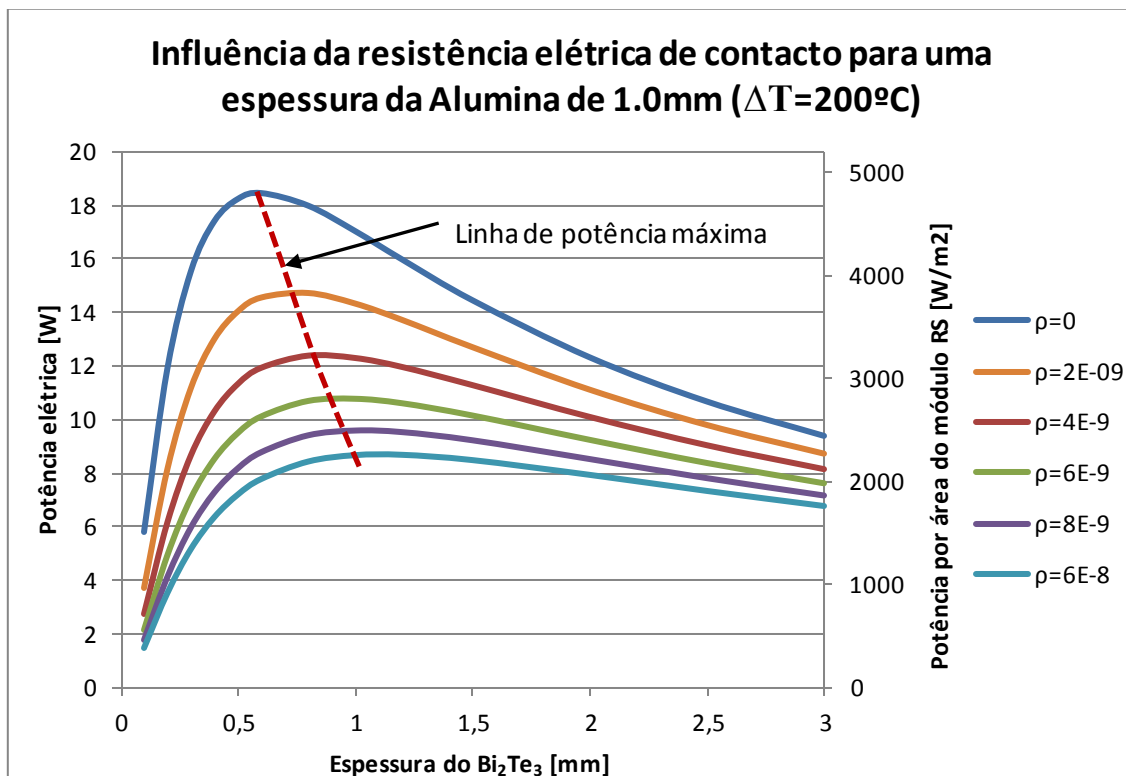


Figura 5.6 - Influência da espessura do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  na Potência elétrica para diferentes valores de resistividades elétricas de contacto ( $\rho$ , em  $\Omega\cdot\text{m}^2$ ), para uma espessura da alumina de 1.0mm e coeficiente de transferência de calor de contacto de  $19000 \text{ W/m}^2\text{K}$  ( $\Delta T=200^{\circ}\text{C}$ )(fatores de forma).

A Figura 5.7, mostra a relação entre a potência específica (potência por unidade de volume de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ) e a eficiência (quociente entre a potência elétrica máxima e a potência térmica fornecida) em função da espessura do telureto de bismuto. Para este caso, usaram-se os coeficientes de transferência de calor de contacto e resistividades elétricas de contacto *standard*,  $h_c=19000 \text{ W/m}^2\text{K}$  e  $\rho_c=6\times 10^{-9}\Omega\cdot\text{m}^2$ , e uma espessura do substrato de alumina de 1mm. Observa-se que a potência específica aumenta à medida que se diminui a espessura do material termoeletrônico. O ponto onde a potência específica é máxima é obtida para espessuras muito pequenas do telureto de bismuto ( $\approx 0.2\text{mm}$ ). É muito importante salientar que o ponto de potência máxima específica não corresponde ao ponto da potência máxima elétrica observado na Figura 5.5 e Figura 5.6. No entanto, para espessuras abaixo dos 0.3mm, a eficiência é muito pequena ( $<1\%$ ). Isto quer dizer não só que serão necessárias quantidades de calor significativas comparativamente à eletricidade produzida, mas também que a densidade de potência (potência por unidade de área de módulo) irá ser muito baixa, sendo necessárias grandes áreas de módulos.

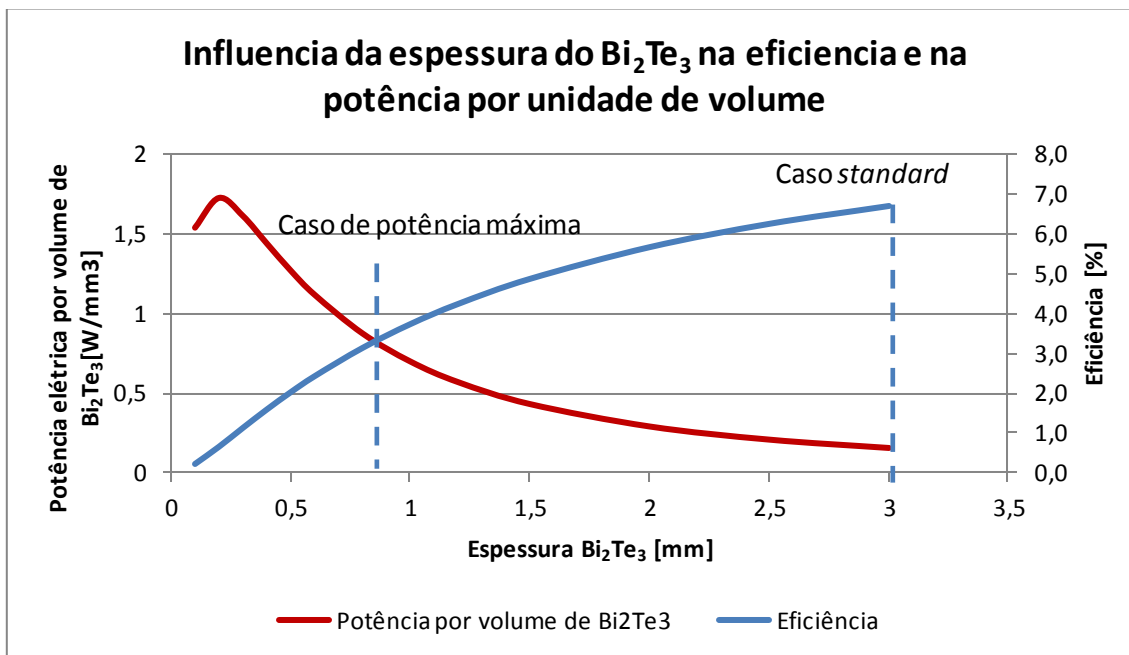


Figura 5.7 – Potência por unidade de volume de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  e a eficiência em função da espessura do telureto de bismuto, ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ )(fatores de forma).

A eficiência aumenta sempre que se aumenta a espessura do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Infelizmente, só é possível obter isso à custa de uma potência elétrica mais baixa (aumentando a espessura acima dos 0,9mm), ou seja, existe maior eficiência de conversão energética (uma maior fração de calor convertido em eletricidade) mas uma menor potência elétrica produzida, assim como uma menor potência térmica transferida. Para além de uma potência elétrica mais baixa também só é possível à custa de um aumento dos custos de material. Isto significa que uma eficiência alta não implica por si só maximizar a potência de saída. Basicamente, aumentando a eficiência, diminui-se a potência térmica usada para uma determinada potência elétrica de saída, mas não se obtêm necessariamente uma potência elétrica mais elevada. O objetivo no estudo dos processos de recuperação de calor desperdiçados, especialmente quando ele é abundante, passa simplesmente por maximizar a potência elétrica de saída, independentemente de, não se utilizar eficientemente a potência térmica. Como se pode ver, a potência térmica não é um fator determinante. Sendo assim, espessuras mais baixas de telureto de bismuto irão aumentar a transferência de calor, e até um certo limite, irá contribuir para maiores potências elétricas.

Outro dos estudos realizados no presente trabalho foi analisar a influência do ar nos módulos termoeletrônicos. Os espaços vazios existentes nos módulos, são naturalmente ocupados por ar. Nesse contexto, a preocupação passou por determinar a sua importância na transferência de calor nos módulos. Geralmente, esses espaços vazios são de pequenas

espessuras, o que torna uma transferência de calor por convecção muito improvável. A única forma de ocorrer uma transferência de calor é por condução ou radiação. Na Figura 5.8, mostra-se a potência térmica e elétrica em função da diferença da temperatura total para os casos adiabático (linhas descontinuas) e com condução de ar (linhas continuas) para duas espessuras de telureto de bismuto, 0.5 e 3.0mm.

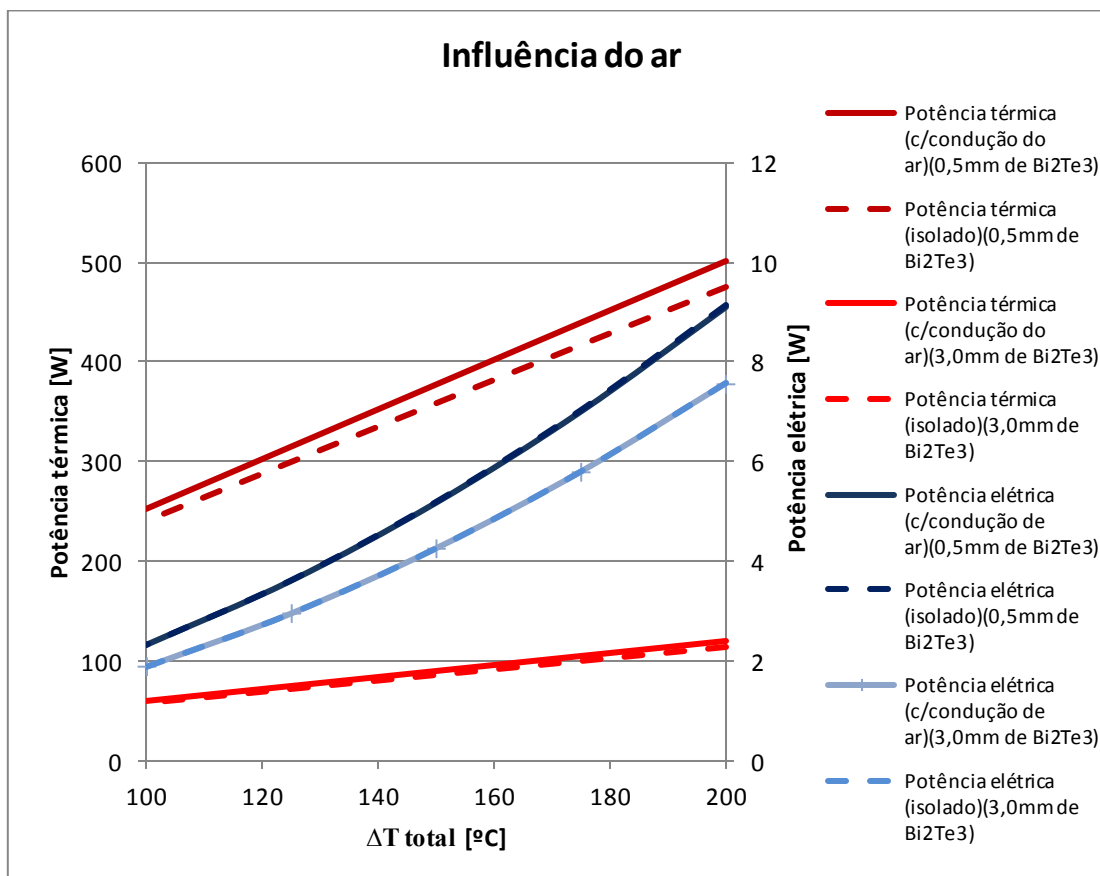


Figura 5.8 – Potência térmica e elétrica em função do  $\Delta T$  para uma espessura 0.5 e 3.0mm de Bi2Te3, representando cada um para condições adiabáticas e com condução de ar (ANSYS CFX).

Todas estas simulações foram realizadas através do *ANSYS CFX*. Na Figura 5.8, observa-se que a existência de condução de ar nos espaços vazios favorece a potência térmica que atravessa o módulo. Para uma espessura de 0.5mm passa dos 475 para os 501W e no caso da espessura de 3mm, aumenta de 114 para 120W. Estes valores representam um aumento de cerca de 5%. A razão para existir mais potência térmica a atravessar o módulo deve-se ao facto de existir mais um meio para transferir calor, neste caso, o ar. A diferença é pequena, pois o ar tem uma condutibilidade térmica muito baixa. Em relação à potência elétrica, esta quase não é afetada pela presença de ar, verificando-se simplesmente uma redução quase impercetível (<0.5%). Esta redução deve-se a uma menor diferença de temperatura nas faces do telureto de bismuto por

redução da resistência térmica total. Porém, a diferença é tão pequena pela simples razão de a variação das temperaturas na face fria e quente do telureto de bismuto ser abaixo dos 0.1%. Logo, na presença de ar, mais potência térmica irá atravessar pelo módulo, porém não suficiente para causar grande impacto na diferença de temperatura das faces do material termoeletrônico que, naturalmente, se traduz numa variação muito pequena da potência elétrica.

### 5.3 Comparação dos métodos de cálculo

Tendo analisado as diversas variáveis que influenciam positivamente ou negativamente os parâmetros de saída do módulo, pretende-se analisar e comparar, neste subcapítulo, alguns dos parâmetros calculados pelas abordagens testadas no presente trabalho para verificar a sua validade.

#### 5.3.1 Diferença de temperatura às faces do telureto de bismuto

O gráfico da Figura 5.9 representa a diferença de temperatura nas faces do telureto de bismuto para uma espessura de 0.5mm (azul) e 3.0mm (vermelho) em relação aos cinco métodos de cálculo, para uma diferença de temperatura total no módulo de 200°C. Também são apresentados os resultados com carga e sem carga nos casos em que os efeitos termoeletrônicos são contabilizados (calor de *Peltier* e *Joule*).

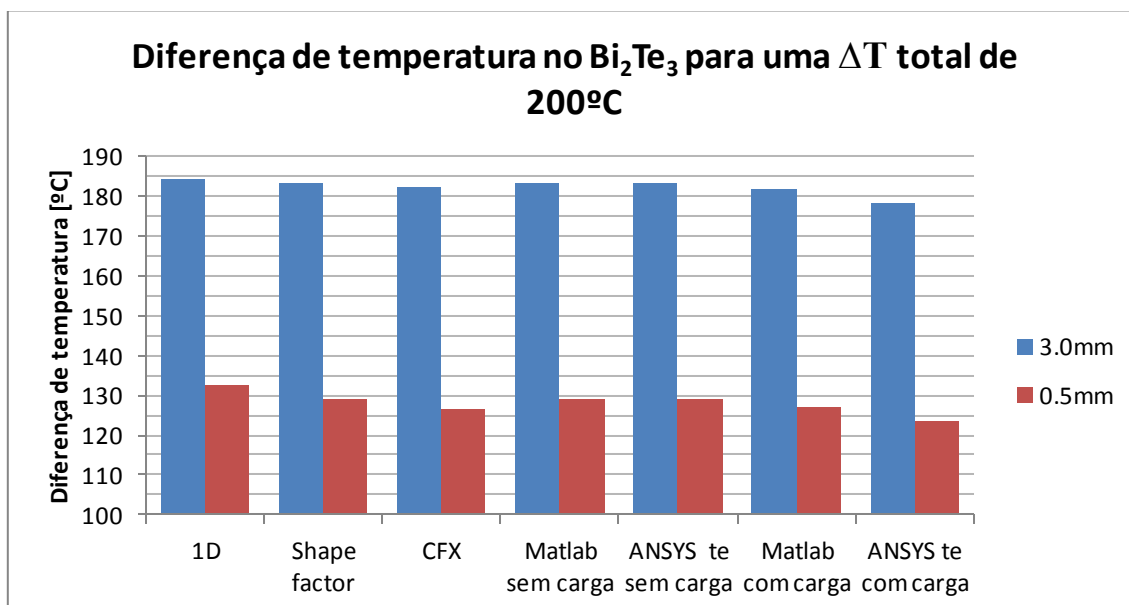


Figura 5.9 – Diferença de temperatura nas faces do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  (para as espessuras 0.5 e 3.0mm) em função dos diversos métodos de cálculo para um  $\Delta T = 200^\circ\text{C}$ .

A Figura 5.9 demonstra que os métodos permitem calcular temperaturas muito semelhantes. Porém nota-se que estas diferenças são maiores em termos relativos para uma espessura de 0.5mm do que para 3.0mm. Isto deve-se ao facto de, que para uma menor espessura as temperaturas locais variarem com maior intensidade. Assim, há uma maior suscetibilidade de erro para os métodos que não contabilizam esse fenómeno. Pode-se observar uma redução do  $\Delta T$  à medida que aumenta a complexidade de simulação para os três métodos que simulam somente o modelo térmico (transferência de calor a 1D, 1D usando fatores de forma e *ANSYS CFX*). Para a espessura de 3.0mm, a transferência de calor a 1D apresenta um  $\Delta T = 184.2^{\circ}\text{C}$ , o fator de forma um  $\Delta T = 183.1^{\circ}\text{C}$  e o *ANSYS CFX* um  $\Delta T = 182.2^{\circ}\text{C}$ . Tomando o *ANSYS TE* como referência, o fator de forma apresenta um desvio de 4.4% e o *ANSYS CFX* 2.4%. Em relação ao *MATLAB*, sem a utilização de uma carga, apresenta um  $\Delta T$  igual a do método do fator de forma, já que a abordagem de cálculo é a mesma. Porém, utilizando uma carga e considerando assim, os efeitos térmicos de *Peltier* e *Joule*, nota-se uma diminuição na diferença de temperatura e aproximando-se do  $\Delta T$  do *ANSYS TE* com carga. Como já foi referido anteriormente, o método mais completo e em princípio mais fiável é o *ANSYS TE*. Observando o Figura 5.9, o *ANSYS TE* e *MATLAB* com carga, apresentam a menor diferença de temperatura de todas as abordagens existentes neste trabalho. Isto é porque estes dois métodos incluem os efeitos de *Joule* mas, principalmente, *Peltier* que origina uma libertação e absorção de calor nas faces do material termoeletrónico. Fazendo com que na face quente (onde existe absorção de calor) aconteça uma redução da temperatura e na face fria (onde existe geração de calor) um aumento de temperatura, tendo como consequência, em termos  $\Delta T$ , um diminuição do mesmo. A diferença do método *MATLAB* e com *ANSYS TE* com carga é de 2.8%. Na Figura 5.10, representa-se a diferença de temperatura entre as faces do telureto de bismuto para uma espessura 0.5mm e 3.0mm em relação aos cinco métodos de cálculo, mas agora, para uma diferença de temperatura total no módulo de  $100^{\circ}\text{C}$ .

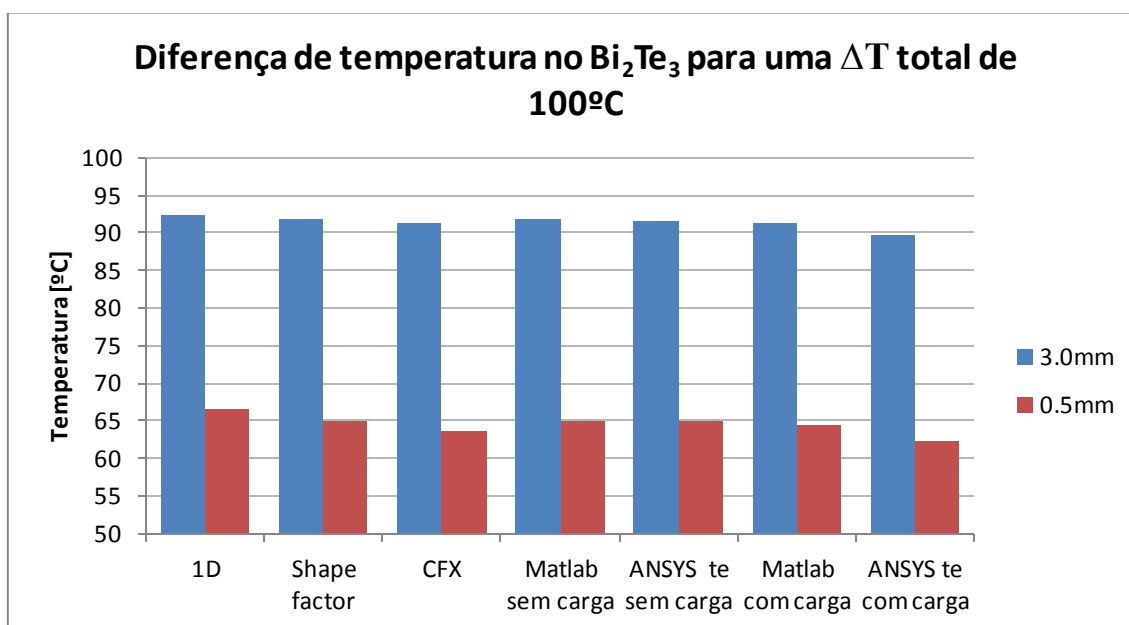


Figura 5.10 - Diferença de temperatura nas faces do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  (para as espessuras 0.5 e 3.0mm) em função dos diversos métodos de cálculo para um  $\Delta T = 100^\circ\text{C}$ .

Comparando o gráfico acima com o gráfico da Figura 5.9, nota-se que o perfil das diferenças de temperatura é igual, porém com uma menor  $\Delta T$  total no módulo, o que causa um menor erro ( $\approx 0.3\%$ ). De resto, os comportamentos são iguais para com uma diferença de temperatura de  $200^\circ\text{C}$ . Analisando com mais detalhe as diferenças entre os métodos para o  $\Delta T$  nas faces do telureto de bismuto, apresenta-se a Tabela 10.

Tabela 10 – Desvios percentuais da diferença de temperatura nas faces do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  dos métodos de cálculo tomando a *ANSYS TE* com e sem carga como referência.

	$\Delta T=200^\circ\text{C}$				$\Delta T=100^\circ\text{C}$			
Espessura	0.5mm		3.0mm		0.5mm		3.0mm	
<i>ANSYS TE</i>	s/carga	c/carga	s/carga	c/carga	s/carga	c/carga	s/carga	c/carga
1D	2.7%	7,3%	0.7%	3.4%	0.6%	6,7%	2.5%	2,9%
Fator de forma	0.0%	4,4%	0.1%	2,7%	0.1%	4,2%	0.1%	2,4%
<i>ANSYS CFX</i>	1.9%	2,4%	0.4%	2,3%	0.4%	2,2%	1.8%	1,9%
<i>MATLAB</i> s/carga	0.0%	4,4%	0.1%	2,7%	0.1%	4,2%	0.1%	0,5%
<i>ANSYS TE</i> s/carga	-	4.4%	-	2,6%	-	4,1%	-	2,3%
<i>MATLAB</i> c/carga	1.5%	2,8%	0.8%	1,8%	0.5%	3,1%	0.9%	1,8%
<i>ANSYS TE</i> c/carga	4.2%	-	2.6%	-	2.2%	-	4.0%	-

Tomando o ANSYS TE como referência (método mais completo e à partida mais fiável) pode-se então avaliar os desvios (em percentagem) presentes na tabela acima. Pode-se observar, no geral, que a diferença de temperatura total pouco impacto tem, como já foi referido anteriormente. Porém, a redução da espessura do material termoeletrónico, tem um efeito negativo na propensão para o erro. Por exemplo, o erro para com o *ANSYS TE* no caso de espessura de 3.0 e 0.5mm, aumenta geralmente entre 2 a 4%. Como já foi dito, isso deve-se ao facto de alguns métodos não serem capazes de resolver o modelo térmico 3D. No caso de baixas espessuras os efeitos 3D térmicos são mais intensos, sendo a análise 1D menos adequada. O facto curioso, é que mesmo que o *MATLAB* (com carga) não resolve esse fenómeno assim como não resolve as temperaturas localizadas (pontos quentes), por causa do aumento da densidade de corrente, continua a ser um dos métodos (juntamente com o *ANSYS CFX*) que apresenta resultados mais próximos ao *ANSYS TE* tanto para médias como baixas espessuras. Para 0.5 e



3.0mm apresenta um erro para com o *ANSYS TE* com carga de 2.8% e 1.8%. Isto quer dizer que a inclusão dos efeitos *Peltier* e *Joule*, mesmo sem a resolução das equações térmicas e elétricas 3D, é uma boa aproximação para obter resultados de forma rápida e com um bom grau de credibilidade. A opção pela inclusão dos *shape factors* nesta análise terá colmatado a falta do cálculo de soluções locais (3D) no campo térmico. Pois comparando este método com o *ANSYS TE* sem carga o erro é praticamente 0% e no caso do *ANSYS TE* com carga para as espessuras 0.5 e 3.0mm apresenta um erro relativo de 4.4% e 2.7%. Pode-se dizer que para espessuras altas e médias do telureto de bismuto este método é uma boa aproximação relativamente ao *ANSYS TE* para os casos com e sem carga, fazendo o balanço da complexidade e tempo de simulação com a aproximação dos resultados para com o *ANSYS TE*.

### 5.3.2 Potência térmica

Na Figura 5.11 pode-se observar a potência térmica, que atravessa o módulo, calculada pelos vários métodos de cálculo, para uma espessura do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  de 0.5mm e para um  $\Delta T$  total de 200 e 100°C.

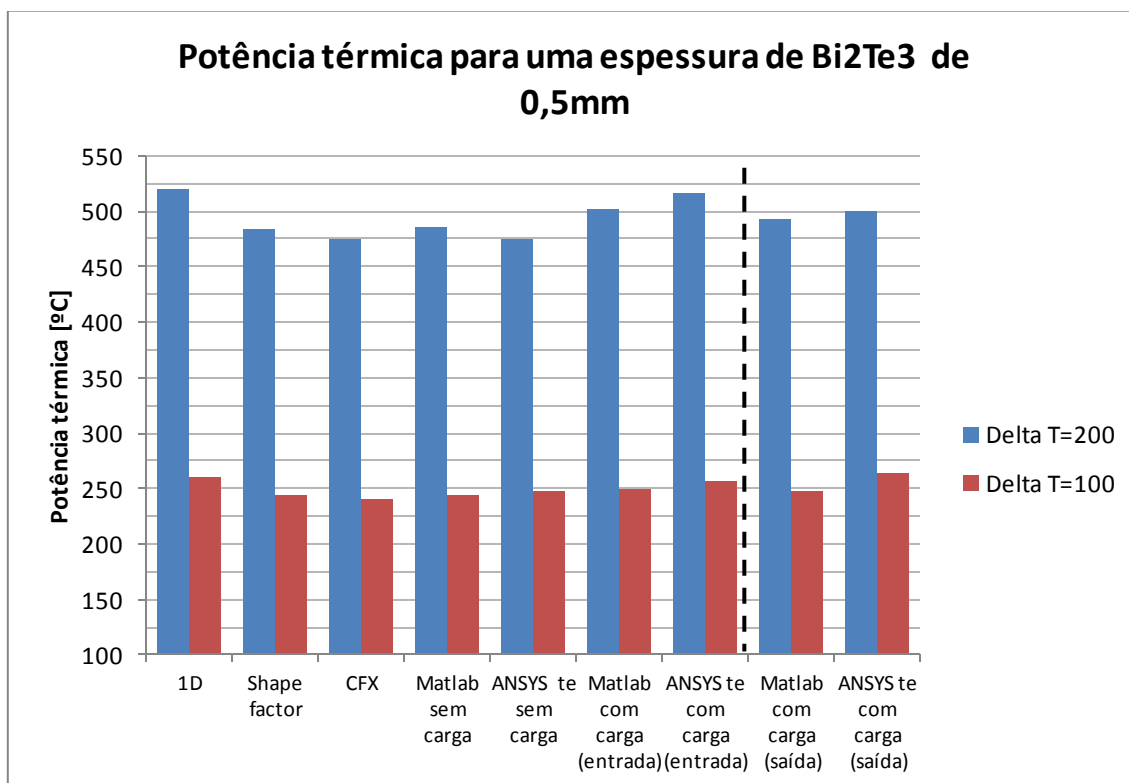


Figura 5.11 – Potência térmica de entrada do módulo (para os  $\Delta T=200^\circ\text{C}$  e  $100^\circ\text{C}$ ) em função dos diversos métodos de cálculo para a espessura de 0.5mm de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ .

O método de transferência de calor a 1D apresenta o maior valor de potência térmica que atravessa o módulo, pois é o método mais incompleto. No fator de forma, consideram-se os efeitos 3D do fluxo de calor, resultando menos potência térmica na face de saída por haver mais restrições. A potência térmica apresentada pelo *ANSYS CFX* é ainda menor. Este método, como já foi dito anteriormente, tem em conta os cálculos da transferência de calor localmente, fazendo variar as propriedades dos materiais quando são dependentes da temperatura. Sabendo que o processo de cálculo do modelo térmico do *MATLAB* em vazio é igual ao método do fator de forma, então as potências térmicas são iguais, como está demonstrado na figura acima. O *ANSYS TE* sem carga, apresenta uma potência térmica muito similar com o *ANSYS CFX*, já que incorpora também a variação de propriedades com a temperatura e também está a excluir os efeitos *Peltier* e *Joule* por estar em aberto (sem corrente). Quando se observa as potências térmicas calculadas em carga no *MATLAB* e *ANSYS TE*, nota-se um ligeiro aumento desta variável comparando com os restantes métodos. Isto deve-se ao facto de que a absorção de calor por efeito *Peltier* na face quente, reduz a resistência à entrada de calor no módulo, aumentando a Potência térmica de entrada. Quando se inclui uma carga elétrica no modelo, este entra em modo geração de calor, ou seja, com os efeitos *Peltier* e *Joule*. Como existe geração de eletricidade, globalmente o módulo absorve mais calor do que liberta, sendo a diferença igual à geração do módulo. Pode-se evidenciar que as potências térmicas de saída, nos casos com carga elétrica, são mais baixas que as potências térmicas de entrada devido ao efeito descrito anteriormente. A Figura 5.12, apresenta a potência térmica para uma espessura de 3.0mm de material termoeletrônico.

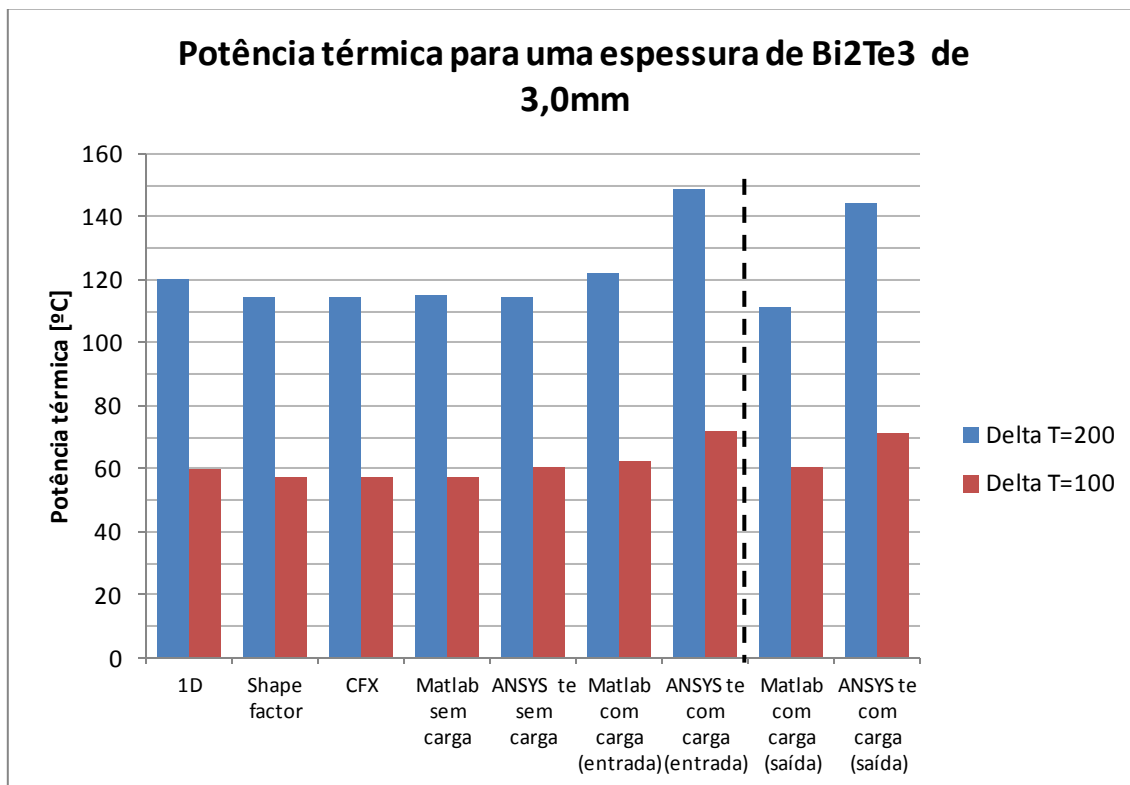


Figura 5.12 - Potência térmica de entrada do módulo (para os  $\Delta T=200^{\circ}\text{C}$  e  $100^{\circ}\text{C}$ ) em função dos diversos métodos de cálculo para a espessura de 3.0mm de Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>.

Pode-se observar que o padrão é quase o mesmo que na figura anterior, excepto que neste caso a potência térmica do *MATLAB* e *ANSYS TE* com carga serem superiores ao resto dos métodos, principalmente, a do *ANSYS TE*. Este aumento de potência térmica nos métodos que incluem os efeitos de *Peltier* e *Joule*, deve-se a uma vasto conjunto de fenómenos que acontecem ao mesmo tempo no módulo termoeletrico, nomeadamente a absorção de calor na face quente, o que facilita a entrada de mais calor para o módulo. Para se analisar com mais rigor, vai se então avaliar o “peso” de todas as potências térmicas existentes do módulo.

A Figura 5.13 representa o peso das diversas potências térmicas existentes ao longo do módulo para uma espessura do telureto de bismuto de 0.5mm. Como se pode observar, 94.4% é a potência térmica à entrada do módulo e 5.6% deriva dos efeitos *Joule* e *Peltier*. Dessa última fatia, 3.7% representa o efeito *Peltier*.

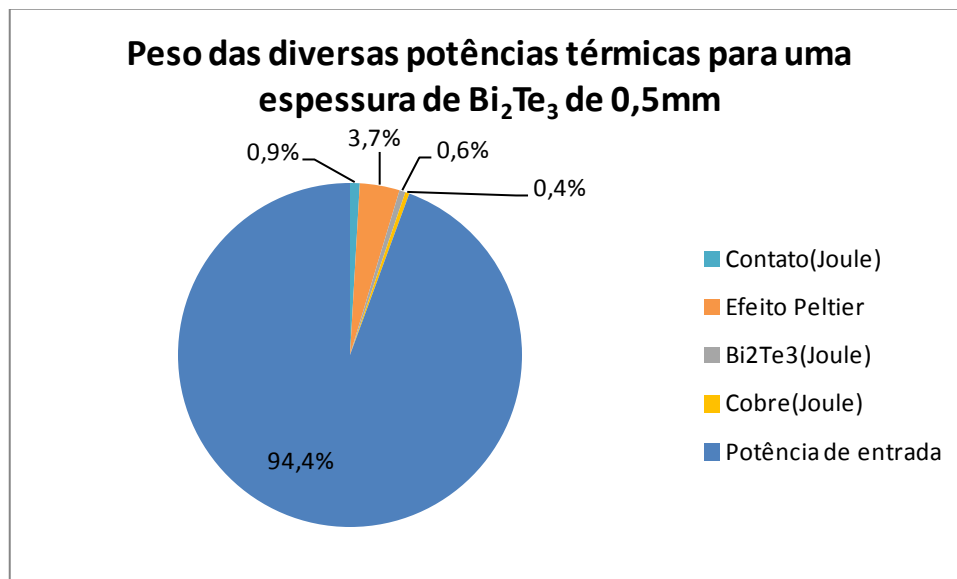


Figura 5.13 – Peso percentual das diversas potências térmicas para a espessura de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  de 0.5mm ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ )(*MATLAB*).

A Figura 5.14, apresenta a mesma análise, mas agora para uma espessura de 3mm. Pode-se verificar que a percentagem de influência dos efeitos de *Peltier* e *Joule* aumentou em aproximadamente 10% em comparação para uma espessura 0.5mm. Estes efeitos têm agora um peso de 18.4% e a potência de entrada apenas 81.6% na potência de saída do módulo termo elétrico. Desses 18.4%, 6.1% representam o efeito *Joule* total no módulo. Não é que os efeitos Peltier e Joule sejam mais intensos no caso dos módulos mais grossos (pois a corrente é mais baixa), o que sim é verdade é que o seu peso, relativamente a potência térmica que atravessa o módulo é muito maior para espessuras maiores de telureto de bismuto.

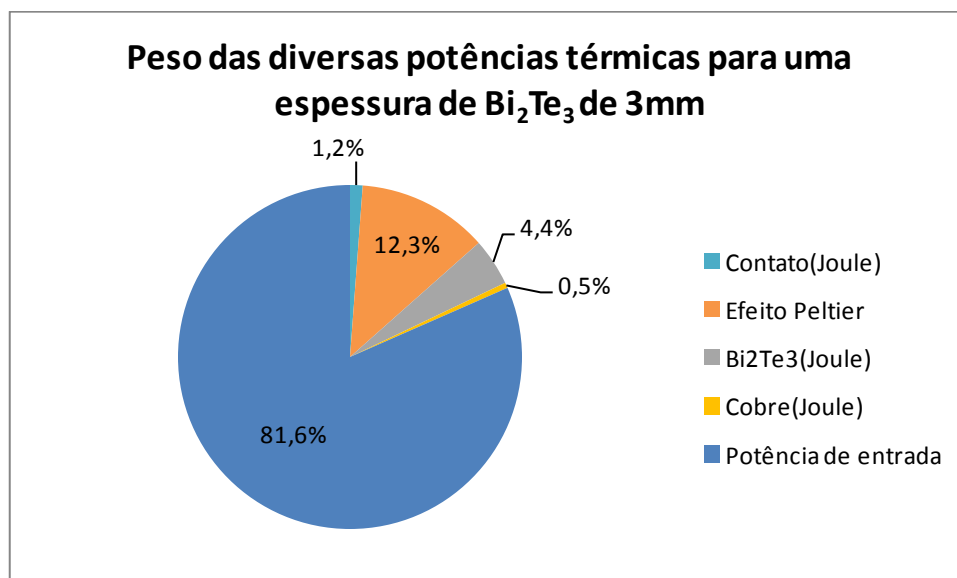


Figura 5.14 - Peso percentual das diversas potências térmicas para a espessura de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  de 3.0mm ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ )(*MATLAB*).

O aumento da espessura do material termoeétrico, origina um aumento também da sua resistência térmica e elétrica. Nestes termos, a potência térmica que entra nos módulos termoeétricos é muito menor, já que está se a considerar um  $\Delta T$  constante de  $200^{\circ}\text{C}$ . Começando pelo efeito *Peltier*, pela Eq. 2.4, este é diretamente proporcional ao produto entre o coeficiente de *Seebeck*, a diferença de temperatura e a corrente elétrica. O coeficiente de *Seebeck* considerado é constante, a diferença de temperatura aumenta ligeiramente, porém a corrente (para condições de máxima potência) diminui com o aumento da espessura, como está ilustrado no Figura 5.15. Logo o efeito de *Peltier* não reduz na mesma proporção que a potência térmica de entrada, levando a que este aumente de peso ao aumentar a espessura do material termoeétrico. A potência de *Peltier* total (soma da potência absorvida com a libertada) representado na Figura 5.15, é negativo pois o módulo termoeétrico absorve mais calor na face quente do telureto de bismuto do que liberta na sua face fria.

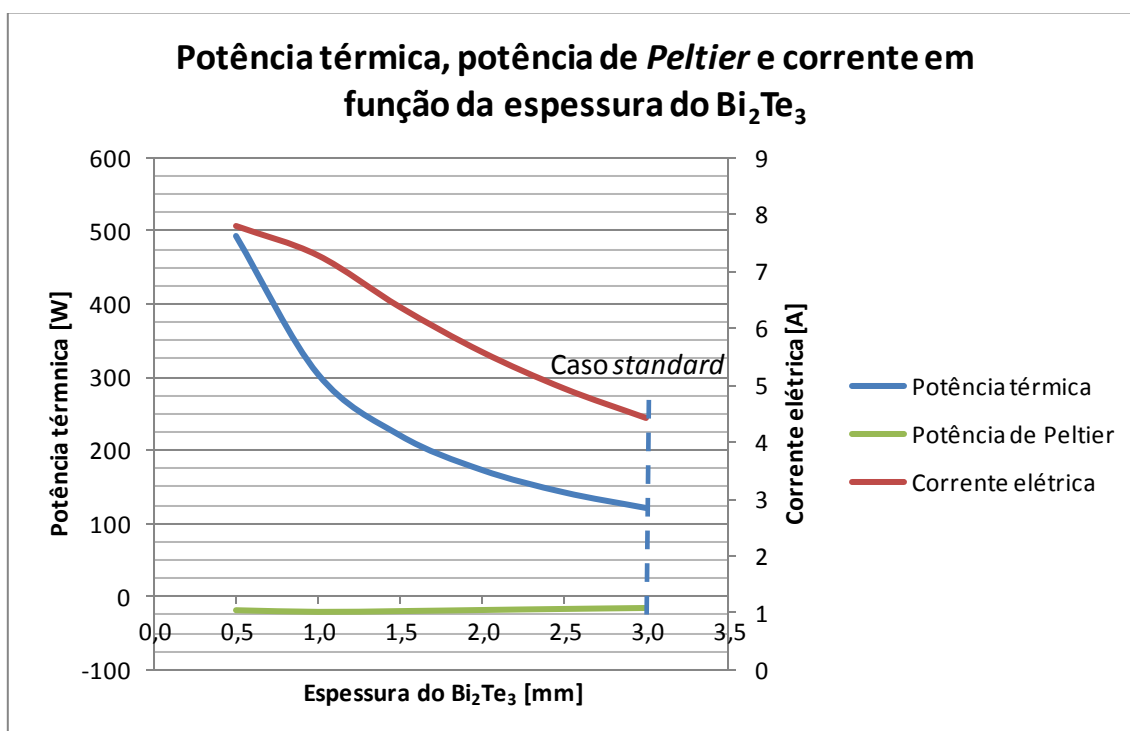


Figura 5.15 – Potência térmica, potência de *Peltier* e corrente elétrica em função da espessura do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  ( $\Delta T=200$ )(*MATLAB*).

O segundo principal aumento relativo, quando se aumenta a espessura, é o efeito Joule no próprio telureto de bismuto. Em condições de potência máxima a resistência de carga é semelhante à resistência interna, logo, a potência dissipada por efeito de Joule é semelhante à potência elétrica gerada. Esta reduz-se de 0.5 para 3.0mm de material termoeétrico mas o rendimento aumenta, logo, o peso do efeito de Joule sobre a potência térmica aumenta com o

aumento da espessura do módulo. Na Figura 5.16, estão representadas as diversas potências em jogo nos módulos termoeétricos.

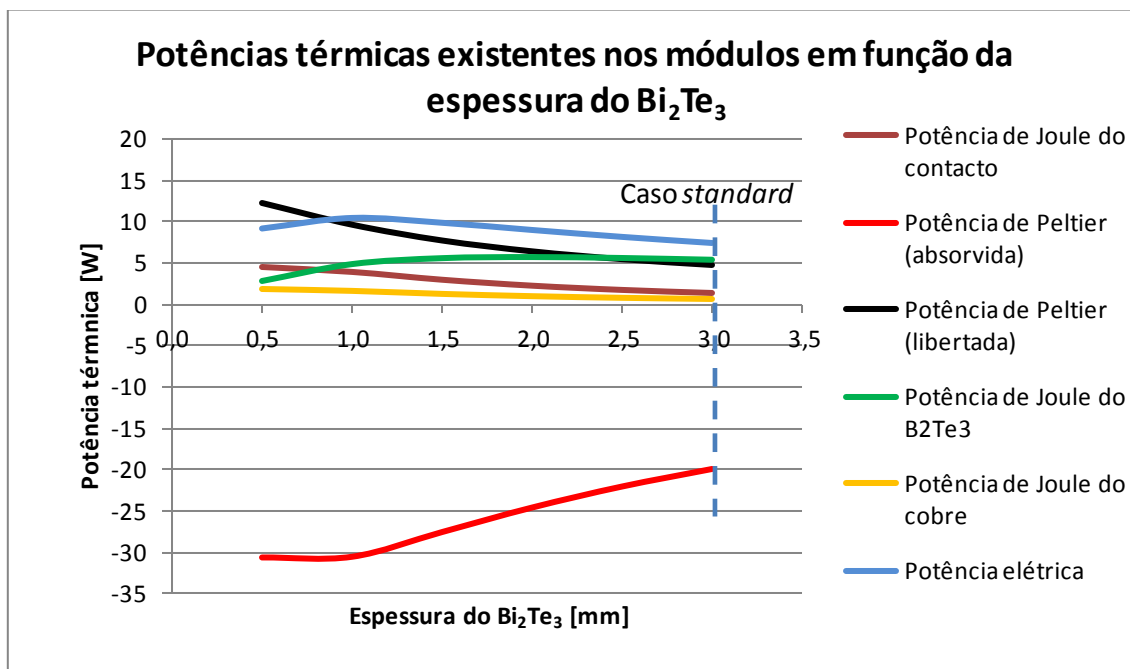


Figura 5.16 – Potências envolvidas nos módulos TE em função da espessura do  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  ( $\Delta T=200$ )(*MATLAB*).

Como foi dito anteriormente acerca do peso do efeito de Joule, pode-se evidenciar esse comportamento no gráfico da Figura 5.16, enquanto que o peso das restantes potências diminui com o aumento da espessura. Nas curvas da potência elétrica e potência de *Peltier* na face quente pode-se observar o ponto de máxima potência elétrica produzida. Por isso, pode-se concluir que para espessuras reduzidas de material termoeétrico a geração de calor é pequena quando comparada como potência térmica que o atravessa o que leva a que o peso dos efeitos termoeétricos não se faça notar muito nos fluxos de calor totais. De notar que a soma de todas as potências em jogo é nula, devido ao princípio de conservação da energia, isto é, o saldo negativo de geração térmica (a potência térmica que “desaparece”) coincide com a potência elétrica gerada.

### 5.3.3 Potência elétrica

A potência elétrica já foi analisada no início deste capítulo, porém vai-se analisar aqui com maior rigor as diferenças entre as abordagens de cálculo. A Figura 5.17, demonstra a potência elétrica para as diversas abordagens de cálculo referidas neste trabalho, para duas diferenças de temperatura distintas ( $\Delta T$ ).

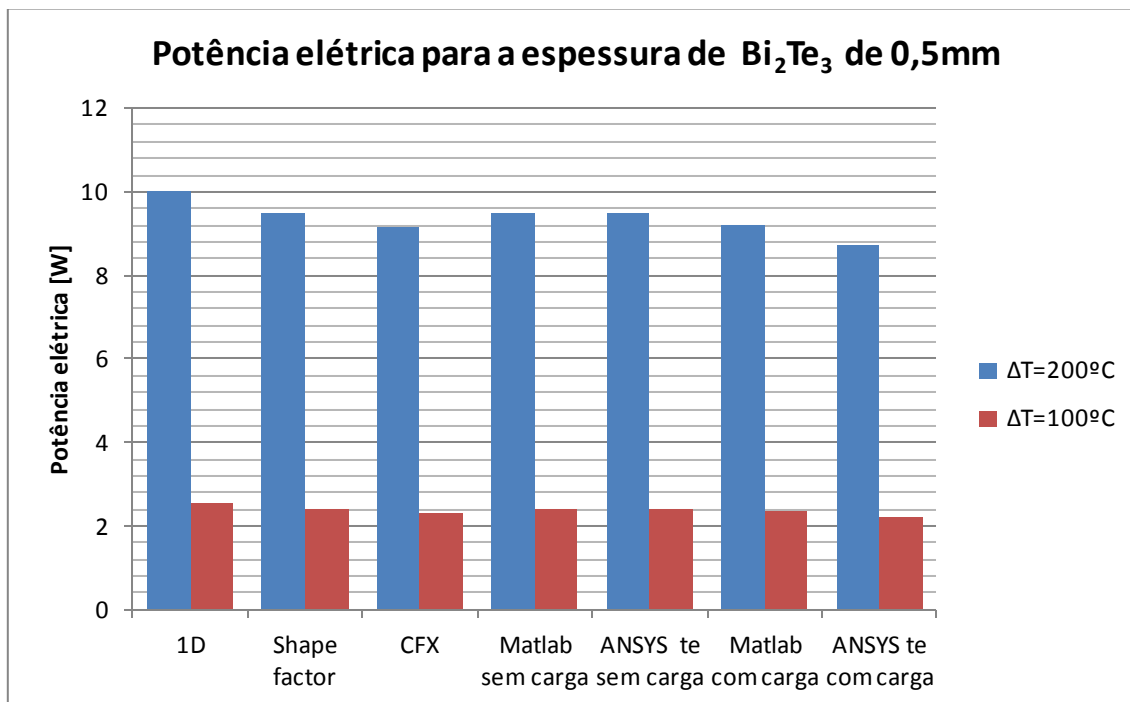


Figura 5.17 - Potência elétrica de saída do módulo (para os  $\Delta T = 200^\circ\text{C}$  e  $100^\circ\text{C}$ ) em função dos diversos métodos de cálculo para a espessura de 0,5mm de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ .

Observando o gráfico acima, verifica-se que para os três primeiros métodos de cálculo (contando a partir da esquerda) que apenas simulam o modelo térmico, à medida que se aumenta a complexidade da simulação, a potência elétrica diminui. Ora isto deve-se, como já foi visto anteriormente, à diminuição da diferença da temperatura nas faces do material termoeletrônico. Pois segundo a Eq. 3.19, a tensão é função dessa diferença de temperatura, pelo efeito de *Seebeck*. Logo pela Eq. 3.23, a potência elétrica vai diminuir na mesma proporção da tensão já que a resistência interna elétrica do módulo é constante para esta espessura. O *MATLAB* sem carga, apresenta uma potência elétrica de saída quase igual à obtida pelo método do fator de forma, pelos motivos já apresentados (o cálculo do modelo térmico é idêntico). O *MATLAB* e o *ANSYS TE* com carga, apresentam potências elétricas ligeiramente inferiores aos restantes métodos. Por um lado, ambos os métodos contabilizam os efeitos de *Peltier* e de *Joule*, que proporciona uma menor diferença de temperatura nas faces do telureto de bismuto, e consequentemente, diminui a potência elétrica. O *ANSYS TE*, para além disso, não utiliza o valor da tensão em vazio para cálculo da potência elétrica de acordo com a Eq. 3.23. A simulação é feita em vazio e em carga separadamente, tendo existido neste último caso a aplicação de uma resistência de carga aproximadamente igual à interna do módulo, calculando a potência elétrica, posteriormente, pela Eq. 3.23. A diferença deve também dever-se a que a resistência interna

calculada com o *ANSYS TE* deve ser maior devido às concentrações de densidade de corrente fazendo com exista pontos quentes.

A Figura 5.18, apresenta a potência elétrica para o caso de uma espessura do material termoeletrônico de 3.0mm.

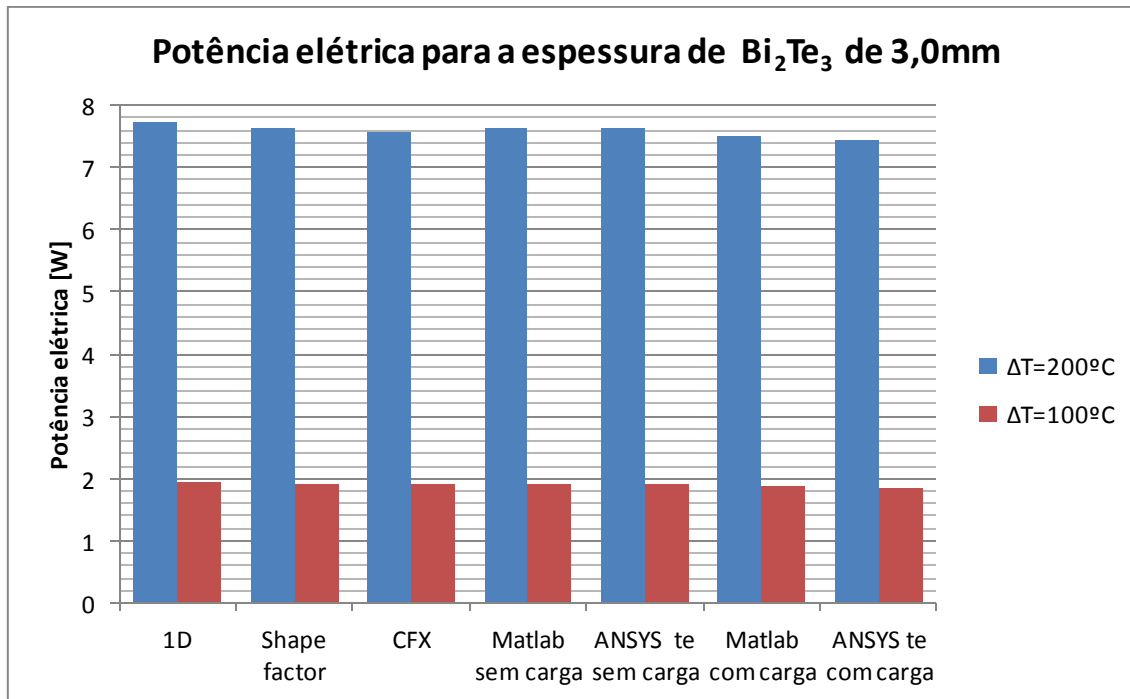


Figura 5.18 - Potência elétrica de saída do módulo (para os  $\Delta T=200^{\circ}\text{C}$  e  $100^{\circ}\text{C}$ ) em função dos diversos métodos de cálculo para a espessura de 3.0mm de Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>.

Pode-se verificar, que o padrão de potência elétrica entre as abordagens é a mesma que na Figura 5.17, porém quando se aumenta a espessura suavizam-se muito mais as diferenças, porque as diferenças de temperatura entre os métodos não variam de uma forma tão significativa para espessuras maiores do telureto de bismuto.

A

Tabela 11 apresenta a compilação dos dois últimos gráficos em termos de diferença percentual, tomando o *ANSYS TE* como referência.



Tabela 11 - Desvios percentuais da potência elétrica dos métodos de cálculo tomando o *ANSYS TE* como referência.

Espessura	$\Delta T=200^{\circ}\text{C}$				$\Delta T=100^{\circ}\text{C}$			
	0.5mm		3.0mm		0.5mm		3.0mm	
<i>ANSYS TE</i>	s/carga	c/carga	s/carga	c/carga	s/carga	c/carga	s/carga	c/carga
1D	5.3%	14,8%	1.4%	3,6%	4.8%	13,3%	1.2%	5,1%
Fator de forma	0.0%	9,0%	0.1%	2,4%	0.2%	8,3%	0.1%	4,0%
<i>ANSYS CFX</i>	3.8%	4.8%	0.7%	1,5%	3.6%	4,2%	0.7%	3,1%
<i>MATLAB</i> s/carga	0.0%	9,1%	0.1%	2,4%	0.2%	8,3%	0.2%	4,0%
<i>ANSYS TE</i> s/carga	-	5,8%	-	0,6%	-	6,1%	-	2,8%
<i>MATLAB</i> c/carga	3.0%	9,0%	1.6%	2,2%	1.8%	8,1%	1.0%	3,8%
<i>ANSYS TE</i> c/carga	8.3%	-	2.2%	-	7.5%	-	3.7%	-

Observando a

Tabela 11, o erro para com o *ANSYS TE* no caso de espessura de 3.0 e 0.5mm, aumenta geralmente entre 4 a 5% para situações que simulam sem uma carga elétrica. As simulações que integram no seu modelo um carga elétrica o erro pode chegar até aos 10%. Tomando o *ANSYS TE* sem carga como referência pode-se observar que os fatores de forma e *MATLAB* constituem excelentes aproximações de potência elétrica. Tendo como referência o *ANSYS TE* com carga, pode-se ver que o *MATLAB* e os fatores de forma chegam a boas aproximações para espessuras médias e grossas de telureto de bismuto.

#### 5.4 Análise térmica e elétrica dos parâmetros de saída no modelo do *MATLAB* com a inclusão dos permutadores de calor

Em todas as análises que se fizeram até agora, manteve-se a face fria do módulo a 50°C. Mas na realidade não é normalmente essa temperatura que se controla manualmente mas sim a temperatura de entrada do fluido de arrefecimento, pois a face fria é arrefecida através de água a circular, que inclusivamente aquece ao absorver o calor dos módulos. Por isso, usou-se o modelo do *MATLAB*, já que o modelo abrange o efeito do gerador termoeétrico existente do Laboratório de motores da Universidade do Minho. Este gerador pode ser visto na referência [4]. A Figura 5.19, demonstra o perfil de temperaturas tendo a temperatura da face fria do módulo fixada em 50°C (linha azul) e uma temperatura de entrada da água a 25°C (linha vermelha).

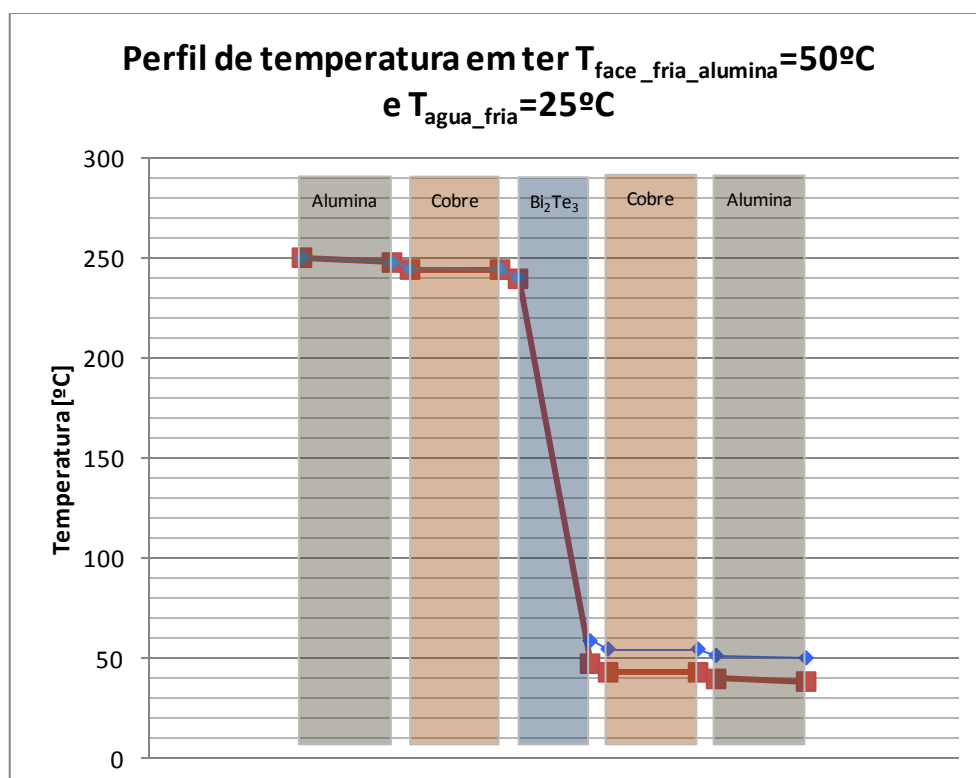


Figura 5.19 – Perfil de temperaturas tendo a temperatura da face fria do módulo a 50°C (linha azul) ou com água a circular a uma temperatura de 25°C (linha vermelha) para a espessura de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  de 3.0mm (*MATLAB*).

Observando o Figura 5.19, pode-se evidenciar um aumento em quase 10°C na diferença de temperatura às faces do telureto de bismuto. Considerando-se 50°C obtém-se um  $\Delta T=181.5^{\circ}\text{C}$ , para o caso de ter água a circular a 25°C verifica-se um  $\Delta T=192.4^{\circ}\text{C}$ . Este aumento equivale a um aumento de aproximadamente 6% na diferença de temperatura. Como tal, este aumento de  $\Delta T$ , causa um aumento da tensão elétrica gerada. Logo, um aumento da tensão nos seus

terminais provoca um aumento na potência elétrica, pela Eq. 3.23. Este aumento em 6% na diferença de temperatura, provoca uma subida em quase 1W na potência elétrica, ou seja, passa de 7,5W por módulo para 8.4W. Isto equivale a uma diferença na potência elétrica de 10%. Ou seja, para módulos de elevada espessura é fácil ter a face fria abaixo dos 50°C pois a potência térmica que é necessário dissipar não é muita.

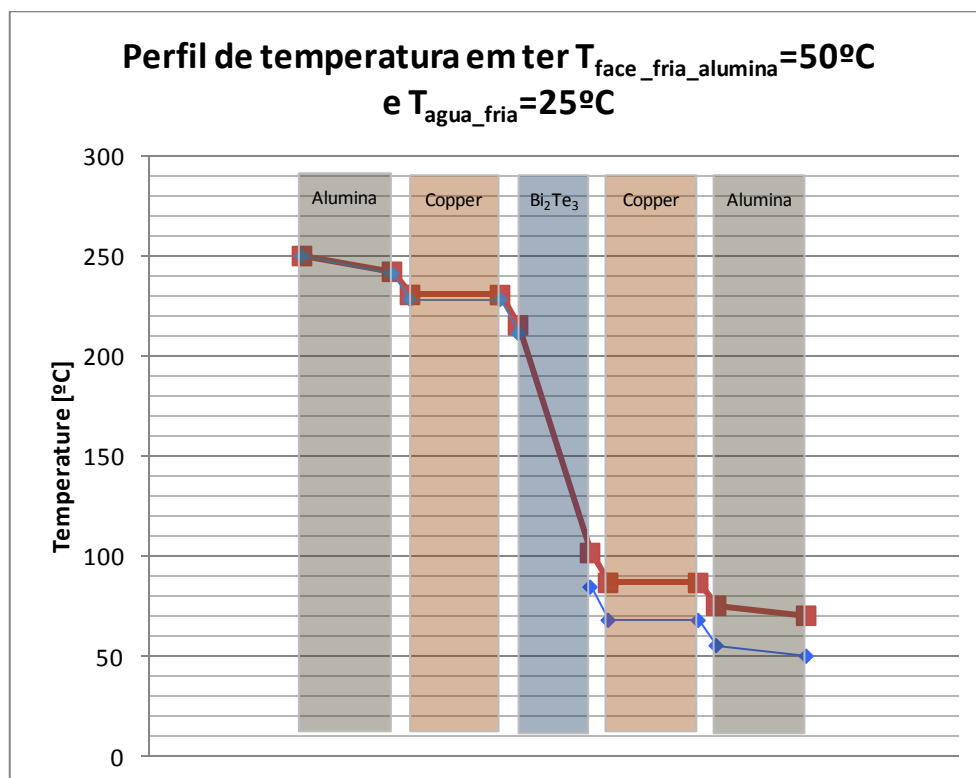


Figura 5.20 - Perfil de temperaturas tendo a temperatura da face fria do módulo a 50°C (linha azul) ou com água a circular a uma temperatura de 25°C (linha vermelha) para a espessura de Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> de 0.5mm (MATLAB).

Observando o Figura 5.20, a diferença de temperatura é menor comparativamente com a da espessura 3.0mm (redução de 55°C). Tendo a água de arrefecimento entrado a 25°C nota-se que a face fria do módulo fica a uma temperatura de 70°C. Em termos de diferença de temperatura nas faces do telureto de bismuto pode-se evidenciar um aumento em quase 13°C. Considerando-se 50°C obtém-se um  $\Delta T=126.9^{\circ}\text{C}$ , para o caso de ter água a circular a 25°C verifica-se um  $\Delta T=113.8^{\circ}\text{C}$ . Esta diminuição no  $\Delta T$  equivale a uma redução em 20% na potência elétrica, passando de 9.2W para 7.4W. Isto significa que é muito mais difícil assegurar uma baixa temperatura na face fria com módulos de baixa espessura. Para conseguir uma temperatura de 50°C será necessário aumentar o caudal de fluido arrefecedor de modo a induzir uma menor resistência térmica de convecção e de modo a que o aumento da temperatura

média da água de arrefecimento seja muito inferior.

A Figura 5.21 representa a temperatura da água de arrefecimento de entrada e de saída em função da espessura do telureto de bismuto de forma a garantir a temperatura na face fria do módulo de 50°C.

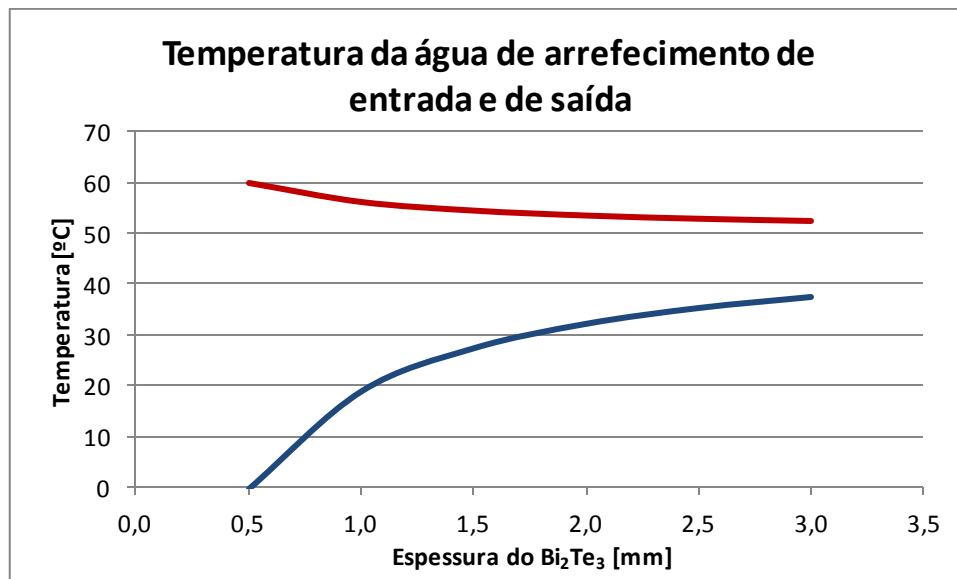


Figura 5.21 – Temperatura da água de arrefecimento de entrada (linha azul) e de saída (linha vermelha) em função da espessura do telureto de bismuto para garantir a temperatura da face fria do módulo de 50°C (MATLAB), para um caudal de arrefecimento de 50 L/h.

Pode-se observar que reduzir muito a espessura do telureto de bismuto tem como consequência ter água de arrefecimento necessita ter uma temperatura dos 0°C na entrada. O que poderá levar a que este sistema não seja viável com este caudal de arrefecimento, sendo necessário aumentar esse caudal ou utilizar um sistema evaporativo tipo *Heat Pipe* que não induza subida de temperatura no fluido de arrefecimento durante a sua ebulição.. Assim, é de grande relevância ter em consideração não só o módulo termoeletrico em si mas também as restrições do gerador termoeletrico. Este estudo foi marginal no presente trabalho pelo que se sugere como trabalho futuro.

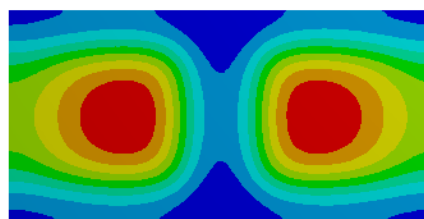
## 5.5 Análise dos comportamentos térmicos e elétricos dos módulos termoeletricos nas simulações numéricas

Neste subcapítulo analisam-se as simulações numéricas que se realizaram no presente trabalho. O *ANSYS Thermal-Electric (ANSYS TE)* permite a simulação de várias variáveis térmicas e elétricas, assim como, observar o comportamento das mesmas ao longo de um TEG. Na Figura 5.22 visualiza-se o contorno do fluxo de calor para uma diferença de temperatura de 200°C no módulo, com uma espessura  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  de 3mm, no *ANSYS TE*. Esta distribuição vai desde a face quente até à face fria do módulo. O contorno do fluxo de calor que se pode visualizar na figura abaixo situa-se na face fria da junção da Figura 3.18.

A: TEG 3mm no load (delta t=200)  
Total Heat Flux 2  
Type: Total Heat Flux  
Unit: W/m<sup>2</sup>  
Time: 1  
04-12-2014 19:48

ANSYS  
v12

55094 Max  
49441  
43787  
38134  
32480  
26826  
21173  
15519  
9865,3  
4211,7 Min



0 0.0025 0.005 0.0075 0.01 (m)

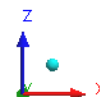


Figura 5.22 – Contorno do fluxo de calor na face de saída da junção no *ANSYS TE* para uma espessura de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  de 3.0mm sem carga elétrica ( $\Delta T=200^\circ\text{C}$ ).

Pode-se observar uma clara concentração do fluxo de calor em dois pontos centrais (zonas vermelhas). Estas zonas denotam que o calor que foi escoado através dos elementos termoeletricos ainda não se dispersou suficientemente pelo metal de junção, o que denota a tridimensionalidade do fluxo de calor nesta região, com uma maior concentração no eixo dos elementos termoeletricos. Segundo a legenda, estas concentrações de calor podem atingir valores máximo na ordem dos 55094 W/m<sup>2</sup>. Nas extremidades do substrato de alumina localizam-se os pontos mínimos (zona azul) de fluxo de calor, tendo como valor mínimo 4211.7 W/m<sup>2</sup>. Mandando o programa calcular o fluxo de calor médio e multiplicando pela área de saída resulta uma potência térmica média de 114.31 W. Na Figura 5.23, pode-se observar um contorno do fluxo de calor na face fria da célula termoeletrica relativamente ao *ANSYS CFX* para

o mesmo caso em questão, isto é, uma espessura de 3mm de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  e um  $\Delta T=200^\circ\text{C}$ . O contorno do fluxo de calor da Figura 5.23, situa-se na face fria do substrato de cerâmica da Figura 3.1. No caso do *ANSYS CFX*, discretizou-se o módulo para um célula unitária, ou seja, metade de uma junção. Pode-se evidenciar que o comportamento é o mesmo para com o *ANSYS TE*, assim como, o fluxo de calor envolvido, segundo as legendas das duas figuras.

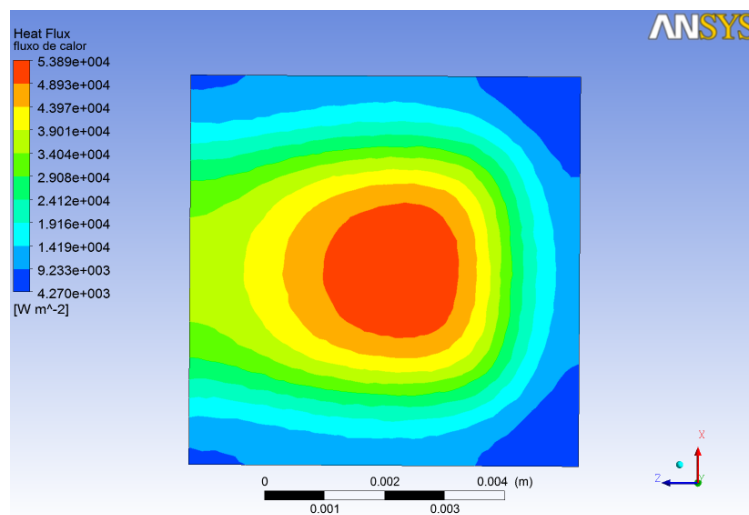


Figura 5.23 – Contorno do fluxo de calor na face fria da célula termoeétrica no *ANSYS CFX*.

Enquanto que o *ANSYS CFX* simula apenas o modelo térmico para obter os dados das temperaturas às faces do telureto de bismuto que, posteriormente, calcula a potência térmica com base na tensão em vazio, O *ANSYS TE* simula também o modelo elétrico com a carga. Em carga, incluem-se os efeitos *Peltier* e *Joule*.

Na Figura 5.24, apresenta-se o perfil de temperaturas para uma espessura do telureto de bismuto de 3.0mm e um  $\Delta T=200^\circ\text{C}$ , simulado pelo *ANSYS TE*.

E: Copy of TEG 3mm with load (delta t=200)  
 Temperature  
 Type: Temperature  
 Unit: °C  
 Time: 1  
 20-10-2014 12:25

ANSYS  
 v12

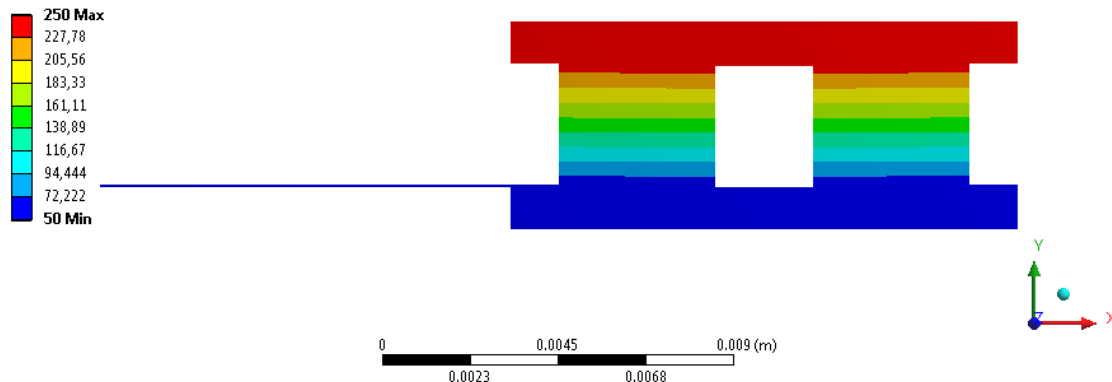


Figura 5.24 – Perfil de temperaturas para uma junção com uma espessura de 3mm de Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> e um  $\Delta T=200^{\circ}\text{C}$ , no ANSYS FE.

A perda de temperatura ao longo da junção verifica-se principalmente no material termoeétrico. Pretende-se que o material termoeétrico, tenha uma resistência térmica elevada, de forma a perder máximo de temperatura possível entre as suas faces para obter um  $\Delta T$  alto. A perda de temperatura na alumina e no cobre em comparação com a perda no telureto do bismuto é mínima como se pode ver na figura acima.

Na Figura 5.25, observa-se a densidade de corrente ao longo do material termoeétrico, simulada pelo ANSYS FE. Como se pode ver, o caminho por onde a corrente percorre não é linear, havendo zonas onde a sua densidade aumenta.

E: Copy of TEG 3mm with load (delta t=200)  
 Total Current Density 3  
 Type: Total Current Density  
 Unit: A/m<sup>2</sup>  
 Time: 1  
 20-10-2014 12:30

ANSYS  
 v12

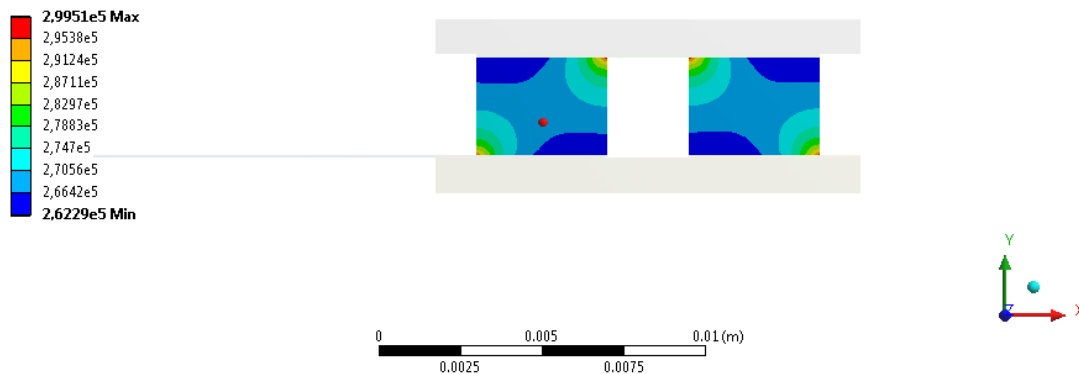


Figura 5.25 – Densidade de corrente ao longo do material termoeétrico, apresentado pelo ANSYS FE.

A corrente tem sempre tendência de chegar ao cobre pelo caminho de menor resistência, levando a que haja zonas localizadas com uma densidade de corrente maior: uma à entrada do telureto do bismuto e outro à sua saída. Isto acontece para cada elemento TE, dois pontos onde a densidade de corrente é máxima. Pela legenda da figura, o valor da densidade de corrente máxima nessas zonas pode atingir valores na ordem dos  $3 \times 10^{-5} \text{ A/m}^2$ , enquanto que as zonas de densidade de corrente mínima com valores  $2.6 \times 10^{-5} \text{ A/m}^2$ . Um aumento da densidade de corrente provoca um aumento da temperatura, segundo o efeito *Joule*. A Figura 5.26 mostra o calor libertado pelo efeito *Joule* nas faces do material termoeletrônico.

E: Copy of TEG 3m m with load (delta t=200)  
Joule Heat 3  
Type: Joule Heat  
Unit: W/m<sup>3</sup>  
Time: 1  
20-10-2014 12:35

ANSYS  
v12

1.2855e6 Max  
1.2578e6  
1.23e6  
1.2023e6  
1.1746e6  
1.1469e6  
1.1192e6  
1.0915e6  
1.0638e6  
1.0361e6 Min

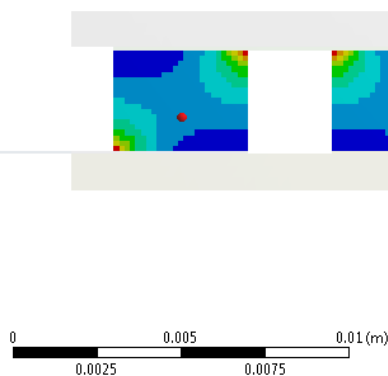


Figura 5.26 – Calor libertado por efeito Joule às faces do material termoeletrônico, apresentado pelo ANSYS TE.

Pela Eq. 2.8, o efeito *Joule* é diretamente proporcional ao quadrado da corrente e à resistência elétrica. Aumentando a densidade de corrente, aumenta-se, consequentemente, o efeito *Joule* nesse local. Isto é, nas zonas onde haja aumento da densidade de corrente, também vai haver zonas quentes, onde o calor libertado pelo efeito *Joule* irá ser máximo, como está demonstrado na figura acima. Segundo a legenda da figura, os pontos com maior valor de calor libertado por unidade de volume apresentam  $1.3 \times 10^{-6} \text{ W/m}^3$ . Nas zonas onde a densidade de corrente é baixa o valor mínimo de calor libertado é de  $1.03 \times 10^{-6} \text{ W/m}^3$ .



## 6. Conclusões e Trabalho Futuro

---

## 6 CONCLUSÕES E TRABALHO FUTURO

A presente dissertação teve como objetivo principal estudar e comparar diversos métodos de cálculo que possibilitassem estudar, caracterizar e otimizar as diversas variáveis que influenciam o desempenho dos módulos termoeletrônicos. Os modelos construídos, com vários graus de complexidade tiveram em vista a possibilidade futura de reduzir a espessura do material termoeletrônico, reduzindo os custos sem prejudicar o seu desempenho.

Inicialmente, construiu-se o modelo de transferência de calor a 1D para estudar a influência das espessuras do substrato de alumina e do telureto de bismuto e verificar os parâmetros de saída dos módulos. Posteriormente adotaram-se fatores de forma, que incorporam efeitos 3D numa análise 1D, quando se deparou com o problema de que nas geometrias de alumina e do condutor metálico de cobre não havia uma relação de área e espessura constantes, não sendo possível simular condições 3D. É um método de cálculo rápido em termos de simulação e fiável à partida segundo os resultados. Tem como pequena desvantagem ter que se calcular os fatores de forma quando se muda a geometria do dado sólido (alumina ou condutor de cobre). Para se poder ter uma ideia do fluxo térmico 3D nos módulos termoeletrônicos, resolveu-se usar o *ANSYS CFX*. É uma abordagem que resolve o problema térmico localmente, porém é morosa a preparação e a execução da simulação, assim como é, necessário possuir uma licença deste programa. Estes três métodos que foram descritos somente simulam o modelo térmico. A realização do modelo elétrico nesses métodos é feito através de cálculos analíticos tendo como inputs as temperaturas da face quente e fria do material termoeletrônico obtidos do modelo térmico. Para se poder simular os efeitos termoeletrônicos num nível mais realístico, utilizou-se o *ANSYS Thermal-electric*. Este método do tipo *multiphysics* permitiu ter uma visão mais ampla do comportamento de diversas variáveis termoeletrônicas, principalmente, os efeitos de *Joule* e *Peltier*. É um método que simula com um bom grau de exatidão porém, tal como o *ANSYS CFX*, é morosa a preparação e a realização da simulação e para além disso a licença deste programa é bastante caro por ser bastante específico. Um modelo termoeletrônico 1D feito pelo grupo em *MATLAB*, permitiu simular as condições termoeletrônicas com um grau de complexidade mais baixa que o *ANSYS TE*. O modelo térmico deste método baseia-se no uso de fatores de forma e integra no seu modelo elétrico os efeitos de *Joule* e *Peltier*. Tem como vantagem ser relativamente rápido a simular comparativamente ao *ANSYS TE* e produzir resultados bastante razoáveis comparativamente à

abordagem mais detalhada (*ANSYS TE*). Para todos estes métodos de cálculo, notou-se que a diferença percentual em relação ao *ANSYS TE*, aumenta à medida que se diminui a espessura do material termoeletrónico (podia atingir os 10%). Provavelmente, deve-se a uma ampliação dos efeitos 3D térmicos e elétricos a baixas espessuras. Pode-se então dizer que para módulos finos convém o uso de um método de cálculo mais completo (ex: *ANSYS TE*) para ter bons resultados mais refinados, para espessuras maiores ou médias, os métodos mais simples conseguem uma boa aproximação, excepto no que toca à potência térmica. Principalmente o método baseado nos fatores de forma produz bons resultados considerando que o tempo de simulação é quase instantâneo. Os diversos métodos são complementares, ou seja, os métodos mais simples permitem calcular para uma gama dilatada de condições em pouco tempo, enquanto que os métodos mais complexos complementam os mais simples por refinar os resultados.

Um *output* direto muito positivo deste trabalho foi a apresentação de uma comunicação na conferência de maior prestígio na área (*International Conference on Thermoelectrics 2014*) e a submissão de um artigo para uma revista internacional de elevado fator de impacto e que é a que mais publica trabalhos ligados à área da termoeletronicidade (*Journal of Electronic Materials*, ver submissão em anexo IV).

Relativamente ao estudo das variáveis que influenciam o desempenho dos módulos termoeletrónicos, existem pontos de potência elétrica máxima para uma dada espessura de material termoeletrónico. Porque para espessuras maiores o  $\Delta T$  é maior, logo a tensão gerada é maior mas para espessuras finas a resistência interna elétrica é menor. Logo é de todo interesse reduzir as espessuras para obter uma maior potência elétrica por módulo reduzindo também os custos associados ao material termoeletrónico para atingir esse pontos de máxima a potência elétrica. Porém, é de salientar, a importância das resistências de contacto. Provou-se que a redução das resistências de contacto, tanto térmicas como elétricas, melhora de forma significativa o desempenho do módulo, principalmente, em módulos com espessura reduzida. Com espessuras reduzidas, o peso das resistências de contacto aumenta significativamente, o que reduz as diferenças de temperatura através do material termoeletrónico responsável pelo efeito *Seebeck*.

O estudo da influência do meio circundante aos elementos termoeletrónicos (ar ambiente) demonstrou que este não altera significativamente o desempenho do módulo, verificando-se diferenças na ordem de 0.5% na potência elétrica. O mesmo acontece com a espessura do substrato cerâmico (Alumina), que pouca influência tem na potência elétrica. A diferença apenas

necessita de ser considerada para reduzida espessura de material termoeletrônico, abaixo de 0.5mm.

Deste projeto, pode-se então dizer que um trabalho futuro relacionado com a investigação e a redução das resistências de contacto nos módulos termoeletrônicos melhoraria significativamente o desempenho dos módulos. Assim como, era possível alcançar o ponto de máxima potência elétrica para espessuras menores do telureto de bismuto. Uma alternativa ou complemento podia ser a pesquisa de geometrias otimizadas de módulos termoeletrônicos de forma a uniformizar a densidade de corrente, evitar '*hot spots*' e consequentemente reduzir a resistência elétrica interna. A pesquisa de materiais termoeletrônicos mais eficientes é uma das necessidades nestes dispositivos. Um estudo que incluísse o efeito da radiação com bom grau de detalhe também seria benéfico para retirar algumas conclusões acerca da sua influência no desempenho do módulo. Seria também importante completar o presente estudo analisando e otimizando a densidade de elementos termoeletrônicos por unidade de área. Incorporar os efeitos termoeletrônicos (*Peltier* e *Joule*) às análises mais simplificadas sem aumentar excessivamente o seu grau de complexidade seria também uma boa adição aos modelos mais simplificados. Para além disso, utilizar valores de propriedades físicas mais realistas (variáveis com a temperatura) aumentaria bastante a fiabilidade de cálculo. Por último, torna-se necessário validar todo este estudo (e futuros relacionados com o tema) com uma atividade experimental para se poder validar os resultados obtidos.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] J. Martins, Motores de Combustão Interna, Porto: Publindustria, 2013.
- [2] M. Marquês, *Potential for ORC application in the Portuguese Manufacturing Industry*, Lisboa, 2014.
- [3] F. P. Brito, L. Figueiredo, L. M. Rocha, L. M. Gonçalves, P. V. Cruz, J. Martins y M. Hall, «Analysis of the Effect of Module Thickness Reduction on Thermoelectric Generator,» *Journal of Electronic Materials*, 2014.
- [4] D. A. d. Sousa, «Reaproveitamento de Calor em Automóveis para Geração de Energia Elétrica Utilizando Módulos Termoeletrônicos,» Guimarães, 2012.
- [5] «Thermoelectrics - Caltech Materials Science,» [En línea]. Available: <http://www.thermoelectrics.caltech.edu/thermoelectrics/history.html#top>. [Último acceso: 21 Março 2014].
- [6] E. Velmre, «Thomas Johann Seebeck (1770–1831),» pp. 1-7, 30 Outubro 2007.
- [7] L. Gonçalves, «Microssistema Termoeletrico Baseado em Teluretos de Bismuto e Antimónio,» Guimarães, 2008.
- [8] L. Gómez, «Laboratório de Eficiência Energética em Edificações,» [En línea]. Available: <http://labeee.ufsc.br/~luis/ecv4211/Apostilas/termopares.PDF>. [Último acceso: 24 Maio 2014].
- [9] Z. Niu, H. Diao, S. Yu, K. Jiao, Q. Du y G. Shu, «Investigation and design optimization of exhaust-based thermoelectric generator system for internal combustion engine,» *Energy Conversion and Management*, vol. 85, pp. 85-101, 2014.
- [10] «Kryotherm - Production of thermoelectric modules,» [En línea]. Available: <http://www.kryothermtec.com/portugal>. [Último acceso: 11 Julho 2014].
- [11] D. M. Rowe, CRC Handbook of Thermoelectrics, CRC Press LLC, 1995.
- [12] F. P. Incropera y D. P. De Witt, Fundamentals of Heat and Mass Transfer, Wiley, 1990.
- [13] Y. A. Çengel y R. H. Turner, Fundamentals of THERMAL-FLUID SCIENCES.
- [14] «Interferência,» 24 Março 2010. [En línea]. Available: <http://interferenciafisica.blogspot.pt/2010/03/transmissao-de-calor.html>. [Último acceso: 24 Março 2014].

2014].

- [15] J. P. Heremans, V. Jovovic, E. S. Toberer, A. Saramat, K. Kurosaki, A. Charoenphakdee, S. Yamanaka y J. Snyder, «Enhancement of Thermoelectric Efficiency in PbTe by Distortion of the Electronic Density of States,» *Science*, p. 554, 2008.
- [16] D. T. Crane y G. S. Jackson, «Optimization of cross flow heat exchangers for thermoelectric waste heat recovery,» *Energy Conversion and Management*, vol. 45, pp. 1566-1582, 2004.
- [17] B. Mazar, «State of the Art Prototype Vehicle with a Thermoelectric Generator.,» de *Te Application Workshop*, Baltimore, 2012.
- [18] R. J. Stevens, S. J. Weinstein y K. S. Koppula, «Theoretical limits of thermoelectric power generation from exhaust gases,» *Applied Energy*, vol. 133, pp. 80-89, 2014.
- [19] N. Q. Nguyen y K. V. Pochiraju, «Behavior of thermoelectric generators exposed to transient heat sources,» *Applied Thermal Engineering*, vol. 51, pp. 1-9, 2013.
- [20] I. Atassi, E. Bauer, J. Nicolics, B. Dangl, L. Spendlhofer, D. Knospe y F. Faistauer, «Current Thermoelectric Materials and an Evaluation of Thermoelectric Material Contacting Approaches,» de *35th Int. Spring Seminar on Electronics Technology*, 2012.
- [21] M. B. Ali Bashir, S. M. Said, M. F. M. Sabri, D. A. Shnawah y M. H. Elsheikh, «Recent advances on Mg<sub>2</sub>Si-xSn<sub>x</sub> materials for thermoelectric generation,» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 37, pp. 569-582, 2014.
- [22] M. S. Dresselhaus, G. Chen, M. Y. Tang, R. Yang, H. Lee, D. Wang, Z. Ren, J.-P. Fleurial y P. Gogna, «New Directions for Low-Dimensional Thermoelectric Materials,» *Advanced Materials*, pp. 1043-1053, 2007.
- [23] M. Martín-González, O. Caballero-Calero y P. Díaz-Chao, «Nanoengineering thermoelectrics for 21st century: Energy harvesting and other trends in the field,» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 24, pp. 288-303, 2013.
- [24] J.-Y. Jang y Y.-C. Tsai, «Optimization of thermoelectric generator module spacing and spreader thickness used in a waste heat recovery system,» *Applied Thermal Engineering*, vol. 51, pp. 677-689, 2013.
- [25] U. Erturun, K. Erermis y K. Mossi, «Effect of various leg geometries on thermo-mechanical and power generation performance of thermoelectric devices,» *Applied Thermal Engineering*, vol. 73, pp. 126-139, 2014.
- [26] D. Ebling, K. Bartholomé, M. Bartel y M. Jäggle, «Module Geometry and Contact Resistance of Thermoelectric Generators Analyzed by Multiphysics Simulation,» *Electronic Materials*,

vol. 39, pp. 1376-1380, 2010.

- [27] M. J. Hall, H. Fateh, C. A. Baker y L. Shi, «High Fidelity Finite Difference Model fo exploring Multi-parameter Thermoelectric Generator Design Space,» p. 40, 2014.
- [28] «RS Components,» [En línea]. Available: <http://il.rsdelivers.com/product/european-thermodynamics/gm250-49-45-25/power-generation-module-250c-36v-122w/6937116.aspx..> [Último acceso: 27 Janeiro 2014].
- [29] RS Components, «Thermoelectric Power Generation Modules,» [En línea]. Available: <http://docs-europe.electrocomponents.com/webdocs/0db9/0900766b80db9a4d.pdf>. [Último acceso: 27 Janeiro 2014].
- [30] F. Leavitt, «Hi-Z,» Estados Unidos, 2014.



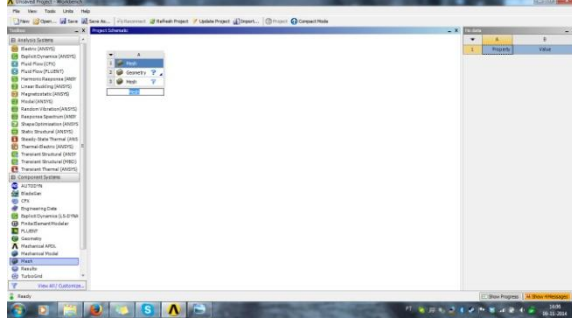
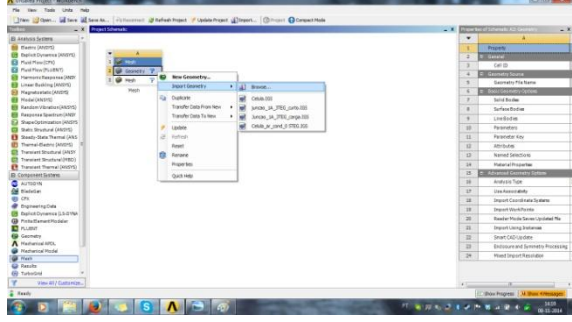
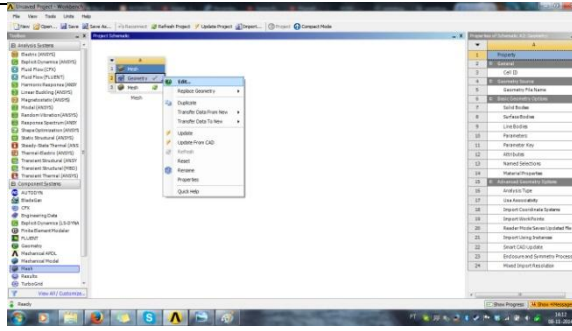
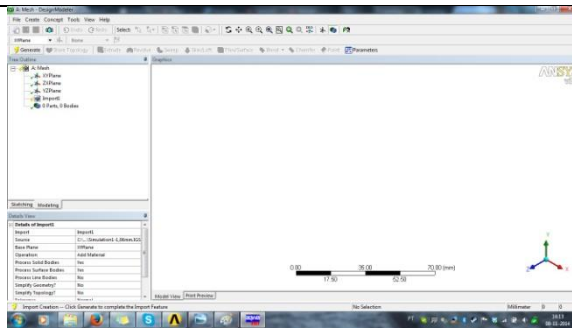


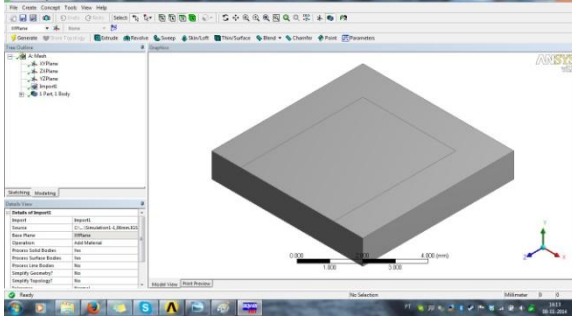
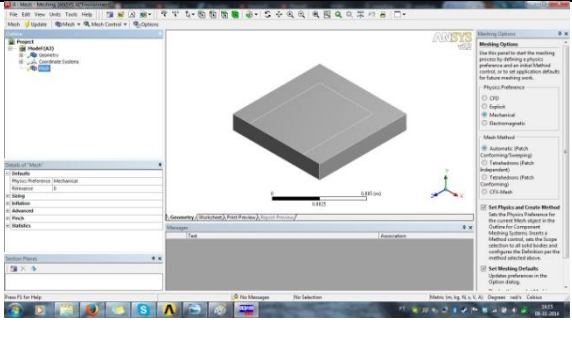
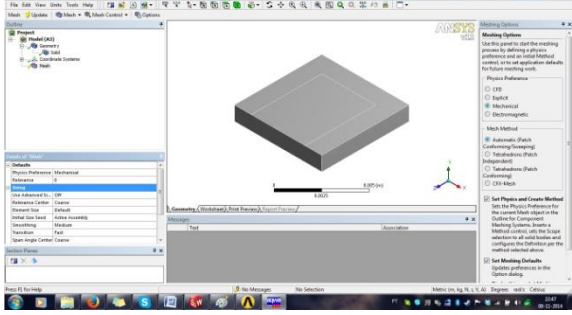
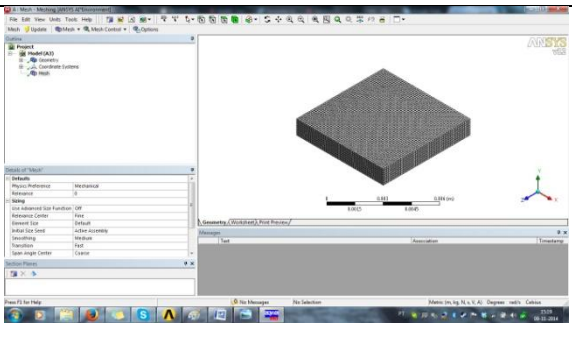
# Anexos e apêndices

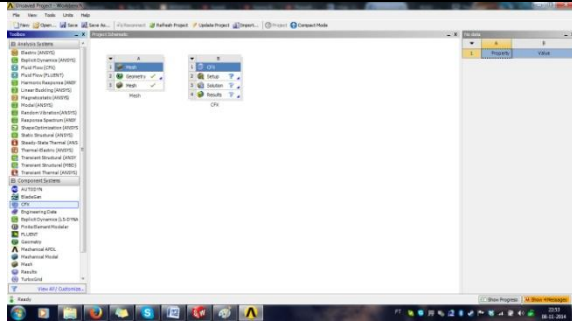

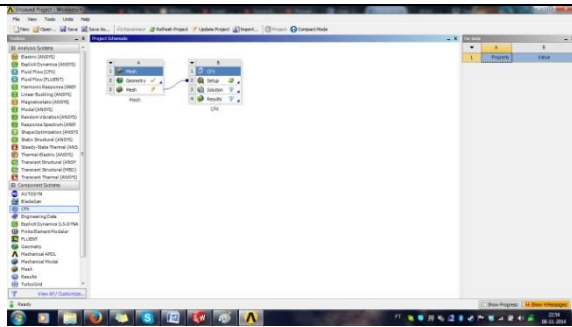
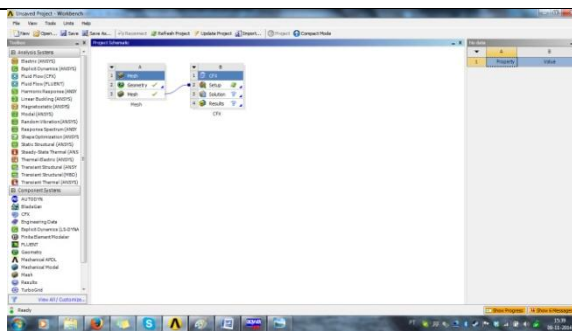

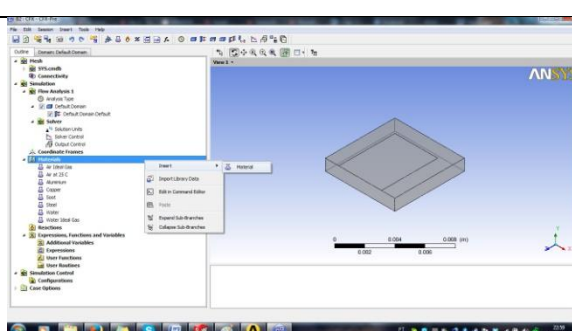


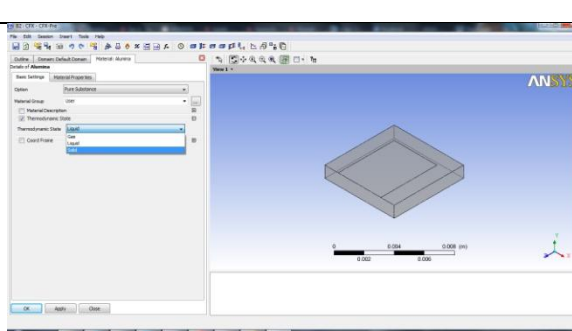
---

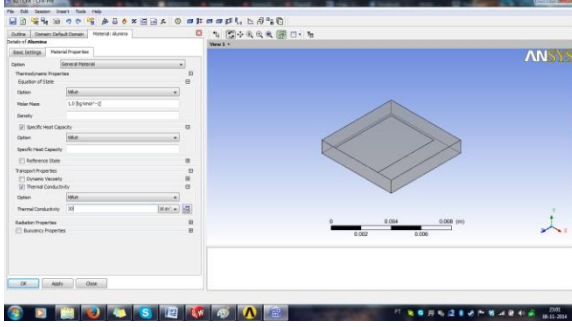
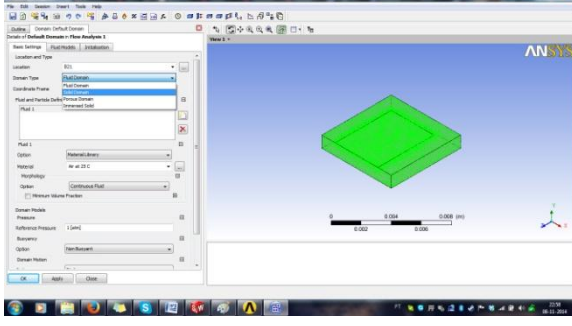
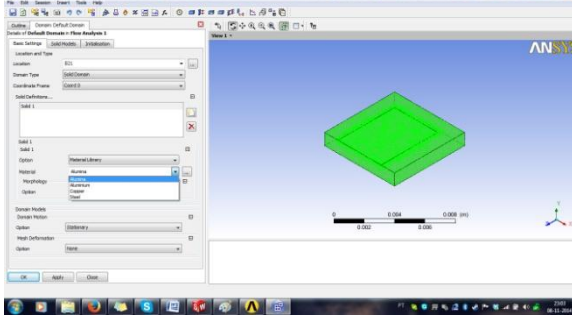
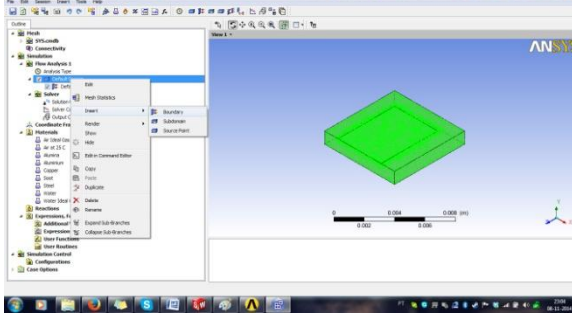
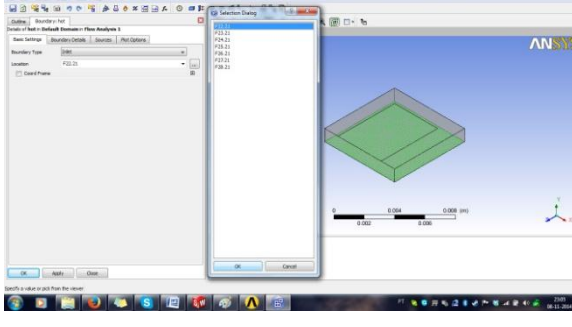
## ANEXO I – METODOLOGIA PARA A CALCULAR O FLUXO DE CALOR NO *ANSYS CFX* (DETERMINAÇÃO DE FATORES DE FORMA)

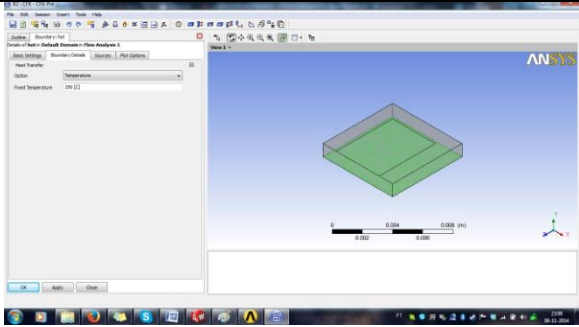
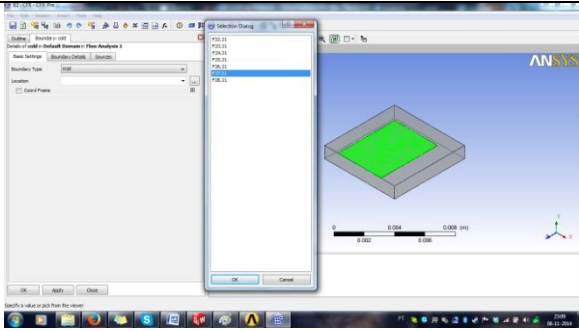
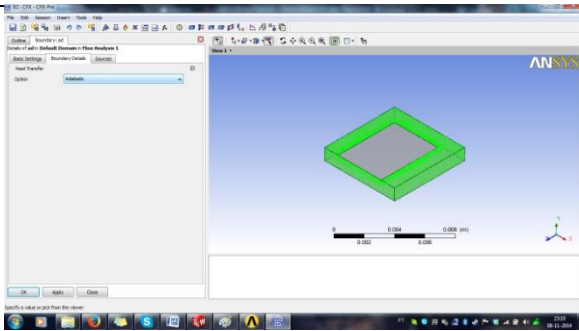
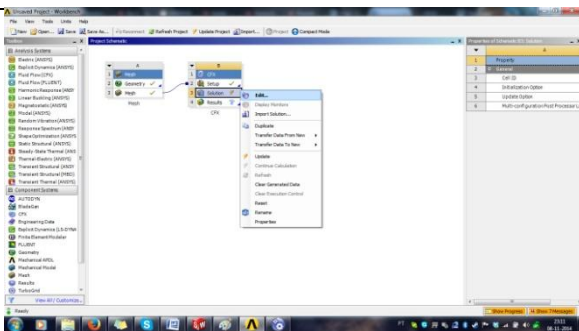

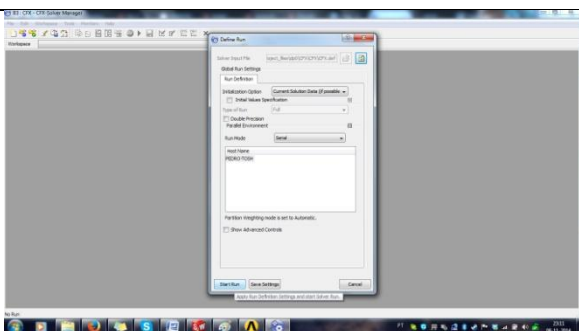
Neste anexo apresenta-se a metodologia para a construção de um modelo térmico com o intuito de calcular o fluxo de calor que atravessa a peça. Com base nessa variável é possível determinar o seu fator de forma como foi descrito no Capítulo 3.

	<p>1 - Tendo o <i>ANSYS Workbench</i> aberto, na secção <i>Component Systems</i>, faz-se duplo clique com o rato direito no <i>Mesh</i> (🧱). Esta divisão permite a criação da malha da peça.</p>
	<p>2 – Em '<i>Geometry</i>' (🧱) importa-se a peça vinda do <i>SolidWorks</i> em formato <i>IGS</i>, com o clique no botão do direito do rato.</p>
	<p>3 – Depois da peça ter sido importada, é necessário gerar a mesma. Para isso, clica-se em editar a secção <i>Geometry</i>.</p>
	<p>4 – Depois da janela do <i>Geometry</i> ter sido aberta, clica-se em '<i>Generate</i>' (⚡) (no canto superior esquerdo) para gerar a peça no <i>ANSYS</i>.</p>

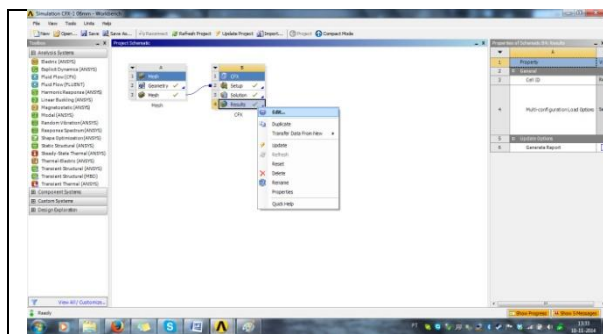
	<p>5 – Como se pode ver a peça já está gerada. Como na secção <i>Geometry</i> não se vai tratar mais nada em termos geométricos, fecha-se a janela. Ao fechar a janela de cada secção, a informação fica gravada no <i>Workbench</i>.</p>
	<p>6 – De volta ao Workbench. Desta vez, vai-se editar o 'mesh'.</p>
	<p>7 – Depois de abrir a Janela, em 'mesh' (📐) é possível ter varias opções para realizar a malha. Neste caso a realização da malha irá ser muito simples.</p>
	<p>8 – Na secção 'sizing', através do Relevance Center pode-se incutir a malha em três formas, automaticamente: fina, media, grossa. Neste caso optou-se por média.</p>
	<p>9 – Depois de impor todos os parâmetros, vai-se ao canto superior esquerdo e clica-se em <i>Update</i> para gerar a malha. Depois de elaborada a malha, fecha-se a janela do <i>Mesh</i>.</p>

	<p>10 – Em <i>Component Systems</i>, faz-se duplo clique em <i>CFX</i>().</p>
	<p>11 – Torna-se necessário fazer o elo de ligação entre o <i>Mesh</i> e o <i>CFX</i>. Arrasta-se a linha 3 (<i>mesh</i>) para a linha 1 (<i>Setup</i>) do <i>CFX</i>.</p>
	<p>12 – Antes de se passar para o <i>Setup</i>(), tem que se clicar em <i>Update</i>(centro superior) para atualizar o projeto. Somente quando aparecer uma setinha verde na linha 3 – <i>mesh</i> é que se pode avançar.</p>
	<p>13 – Tendo a janela do <i>Setup</i> aberta, a primeira coisa é definir o material na biblioteca do ANSYS. Neste caso vai ser Alumina. Em <i>Materials</i>()-&gt;<i>Insert-&gt;Material</i>().</p>
	<p>14 – Depois de inserir o nome do material, Aparece o separador <i>Basic settings</i>. Em <i>Thermodynamic state</i> muda-se para estado sólido.</p>

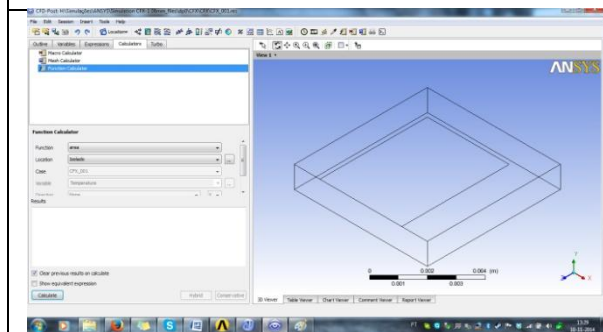
	<p>15 – Passando para <i>Material properties</i>, insere-se aqui a densidade, calor específico e a condutividade térmica. Termina-se assim a definição do material clicando sempre para cada separador <i>Apply</i>-&gt;<i>OK</i>.</p>
	<p>16 – Agora define-se o sólido em questão ao clicar em <i>default domain</i> ( ). Aparecendo <i>Basic Settings</i>, muda-se logo o estado do material para sólido.</p>
	<p>17 – Depois de se ter mudado para o estado sólido, aparece define-se o tipo de material: alumina.</p>
	<p>18 – Agora torna-se necessário definir as condições de fronteira. Em <i>Default domain</i>, clica-se com o rato direito-&gt;<i>Insert</i>-&gt;<i>Boundary</i> ( ).</p>
	<p>19 – Nos <i>Basic settings</i>, escolhe-se a face inferior para definir a fonte de calor.</p>

	<p>20 – Em <i>Boundary details</i>, escolhe-se o tipo de condição. Neste caso é uma temperatura imposta a 250°C.</p>
	<p>21 – A próxima condição de fronteira, é a interface superior. Para esta impõem-se também um temperatura, a 240°C.</p>
	<p>22 – A última condição de fronteira são as restantes faces da geometria. Neste caso impõem-se a condição de adiabático. Com isto, está terminado os <i>Setups</i>.</p>
	<p>23 - No Workbench, clica-se em <i>Solution</i>().</p>
	<p>24 – Aparecendo a janela, escolhe-se o modo de cálculo somente e manda-se assim simular a peça toda.</p>

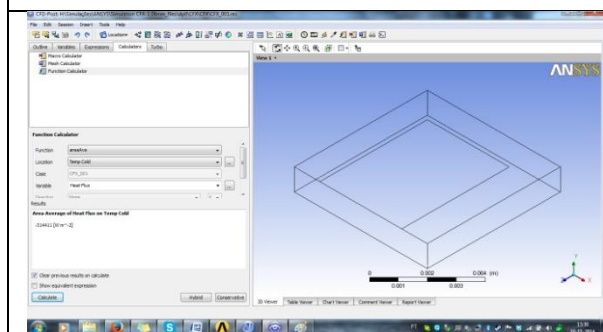




25 – Depois do processo de iteração estar terminado, pode-se então ver os resultados. Para isso vai-se ao *Workbench* e faz-se duplo clique em *Results* (📊).



26 – Depois da janela estar aberta, vai-se ao separador *Calculators* e depois em *Function Calculator* (📊).

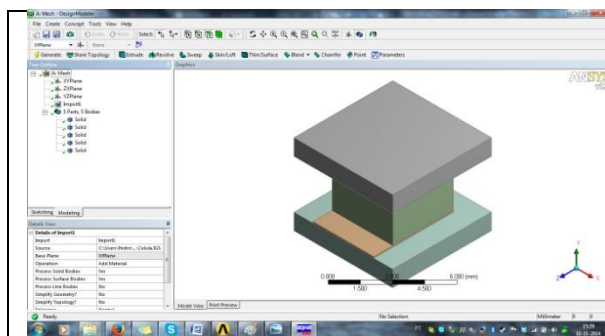


27 – Para determinar o fluxo de calor, seleciona-se a função '*areaAve*', a localização que é a interface de contacto com o cobre e a variável que é o fluxo de calor. De seguida, clica-se em *Calculate* e o programa apresenta o respetivo resultado.

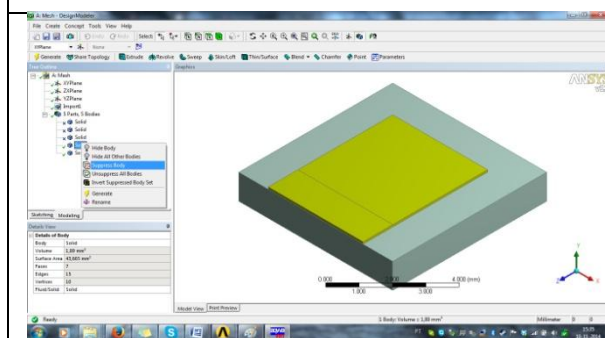
## ANEXO II – METODOLOGIA PARA REALIZAÇÃO DE UMA SIMULAÇÃO NO *ANSYS CFX* DE UMA CÉLULA TERMOELÉTRICA.

Neste anexo, apresenta-se a metodologia para a construção do modelo térmico de uma célula termoeletrônica no *ANSYS CFX*.

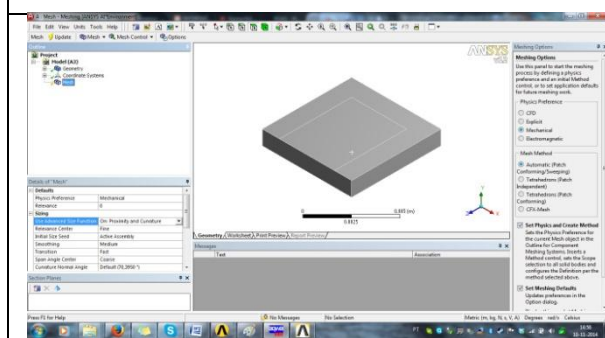
A realização da malha tem que se fazer peça a peça. Logo no *ANSYS Workbench* vai se ter no total cinco módulos de *Mesh* para posteriormente se ligarem a um módulo do *CFX*. A execução da malha para a geometria da alumina já foi explicada no Anexo anterior, porém vai-se inserir mais umas particularidades para efeitos de simulação.



1 - No Workbench adiciona-se um módulo *Mesh* (🧱) e importa-se a geometria completa da célula e gera-se a mesma.

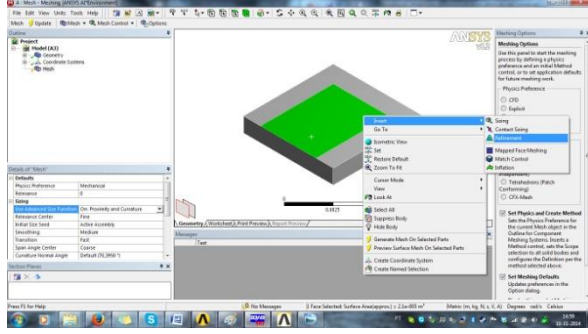

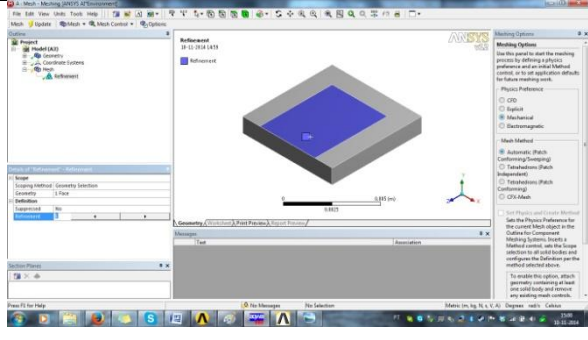
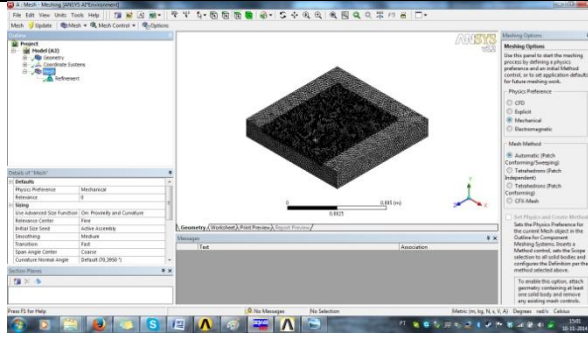

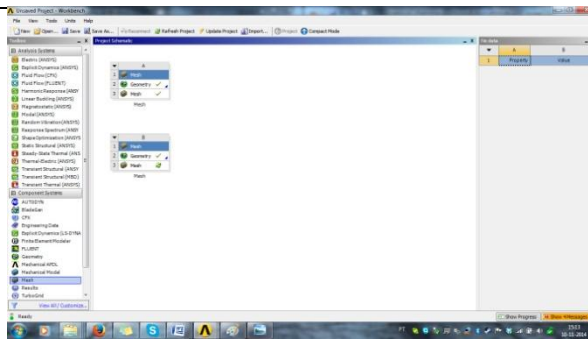
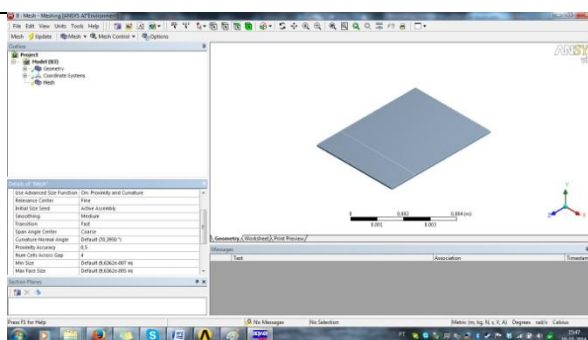


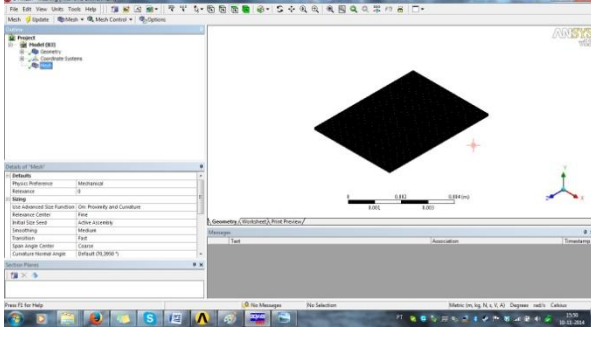
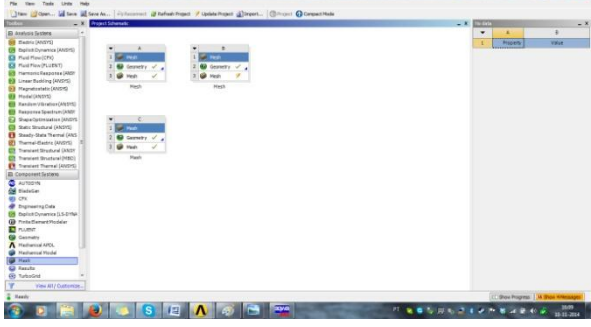
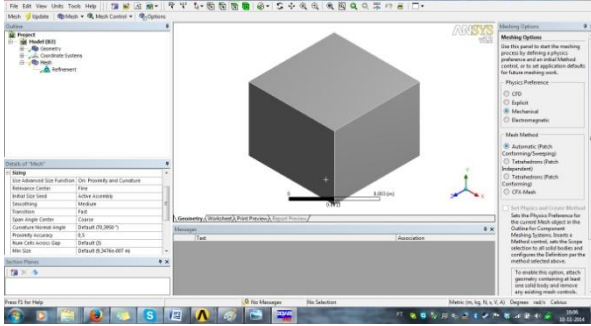
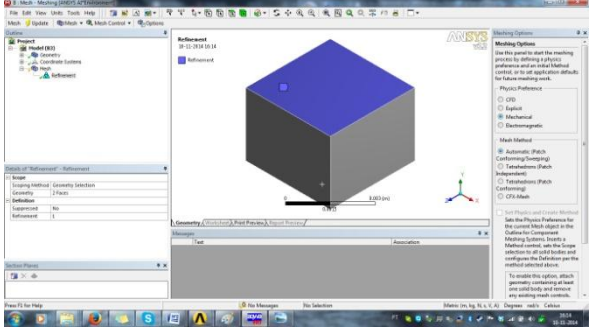
2 – De seguida, para proceder a malha de cada peça que constitui á célula termoeletrônica supprime-se as restantes até restar um, neste caso a alumina. Para isso vai-se à secção *Bodies* e com o rato direito clicka-se *Suppress Body* (🗑️) para cada um. Depois disto, procede-se a realização da malha no Workbench em mesh (🧱).

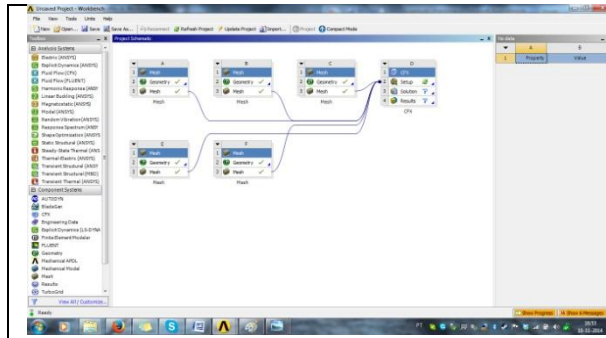


1 –No *Mesh* (🧱), na opção *Use Advanced Size Function* mete-se *On: Proximity and Curvature*. No *Relevance Center* escolhe-se *Fine*. Com estas duas opções, de uma forma automática, a malha fica mais refinada.

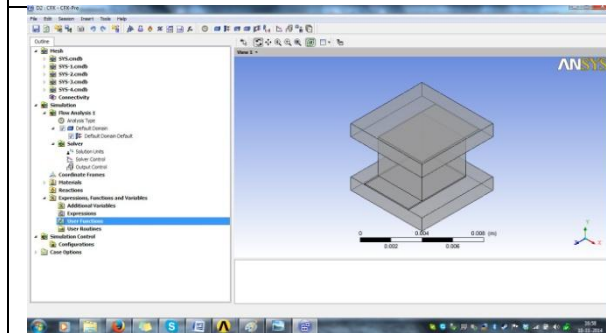


	<p>2 – Na interface que vai estar em contacto com o cobre, clica-se com o rato direito e <i>insert-&gt;Refinamente</i>(). Como o cobre vai ter uma malha muito fina devido a sua espessura reduzida, concentra-se então a malha da alumina nesta face.</p>
	<p>3 – Existem três níveis de Refinamento da malha, Para este caso basta meter '1'.</p>
	<p>4 – Clicando em <i>Update</i>(), para gerar a malha, o resultado é como se evidencia na figura ao lado.</p>
	<p>5 – Voltando ao Workbench, insere-se outro módulo <i>Mesh</i>, para o caso do cobre. Realiza-se o mesmo procedimento, de importar a peça total, gerar a mesma e suprimir as diversas geometrias deixando o cobre e, posteriormente, vai-se a elaboração da malha.</p>
	<p>6 – Para a malha do cobre:</p> <p><i>Use Advanced Size Function-&gt;Proximity and Curvature</i></p> <p><i>Relevance Center-&gt;Fine</i></p> <p><i>Num Cells Across Gap-&gt; 4</i></p> <p>Esta última opção tem como opção</p>

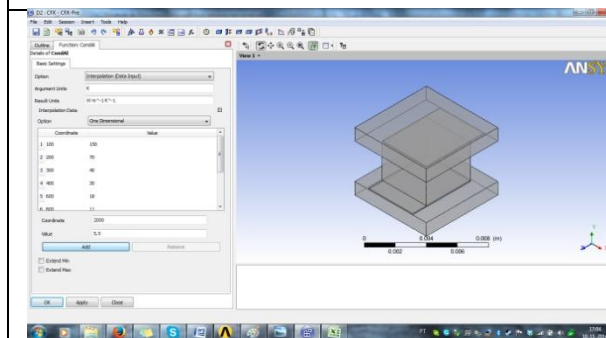
	<p>garantir o número de elementos para a espessura da peça.</p>
	<p>7 - Clica-se em <i>Update</i> para realizar a malha e o resultado é o que representa a figura ao lado.</p>
	<p>8 - No <i>Workbench</i>, insere-se outro módulo <i>Mesh</i>, para o caso do telureto de bismuto. Realiza-se o mesmo procedimento, de importar a peça total, gerar a mesma e suprimir as diversas geometrias deixando o material termoeétrico e, posteriormente, vai-se a elaboração da malha.</p>
	<p>9 - Para a malha do cobre:</p> <p><i>Use Advanced Size Function-&gt;Proximity and Curvature</i></p> <p><i>Relevance Center-&gt;Fine</i></p>
	<p>10 – Insere-se um <i>Refinement</i> na face superior e inferior, que estão em contacto com o cobre.</p>



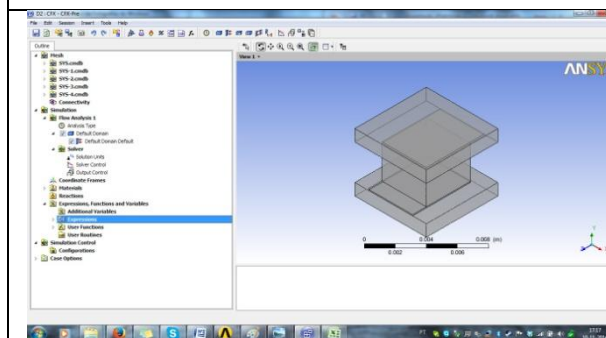
11- Repete-se o mesmo procedimento para os dois últimos objetos: cobre e alumina (Passo 1 até 7). Depois de ter as malhas feitas para todas as peças que constituem a célula termoeletrica. Liga-se os módulos *Mesh* ao módulo *CFX* (🔗) e faz-se o *Update* no Workbench. De seguida vai-se aos *Setup* (🔧) do *CFX*.



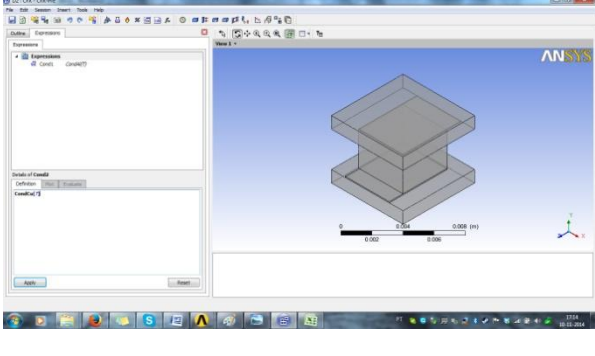
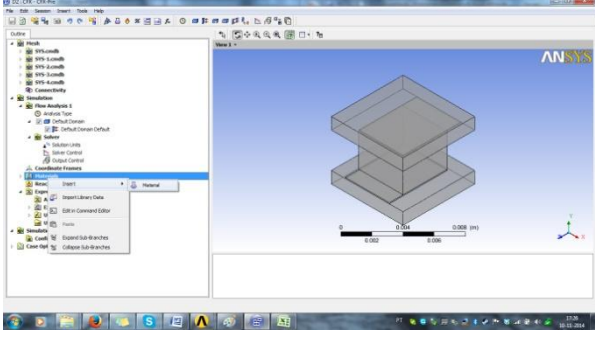
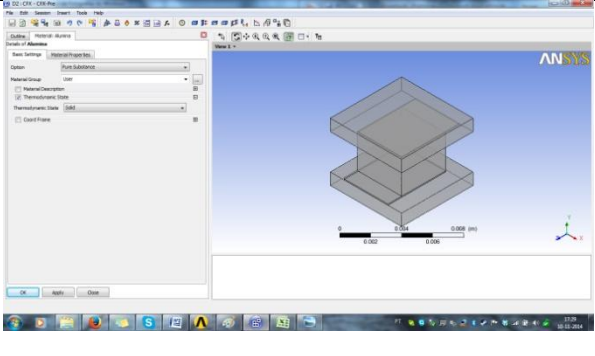
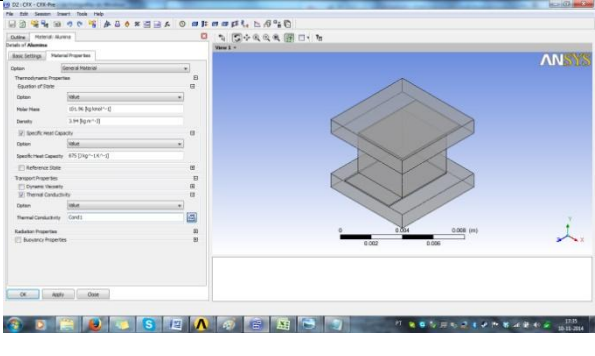
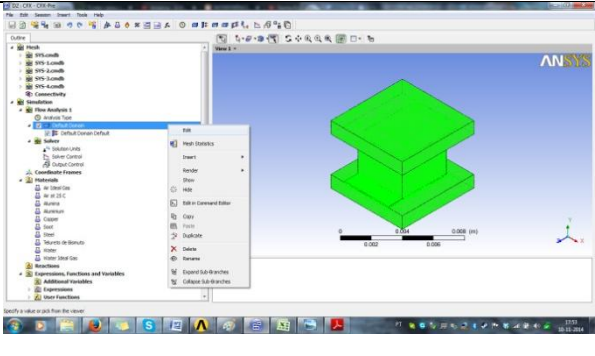
12 – A primeira coisa que se tem de fazer são introduzir as condutibilidades que variam com a temperatura, neste caso, da alumina e do cobre. Para isso vai-se a *User Functions* (🔧) e com o rato direito clicka-se em *insert*.

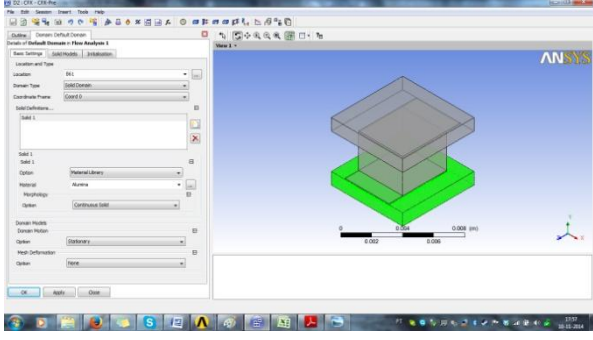
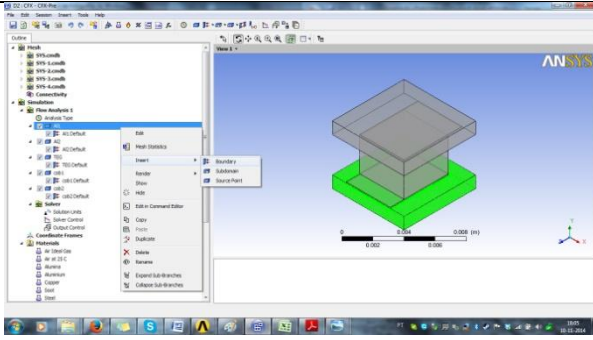

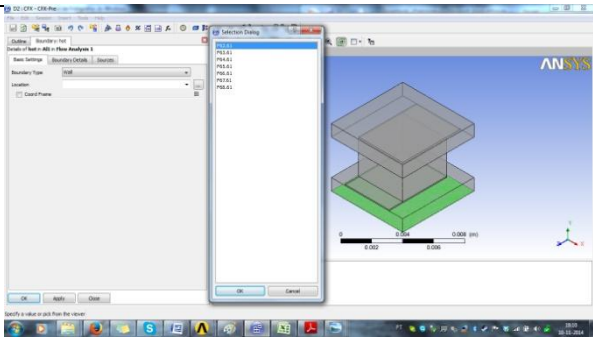
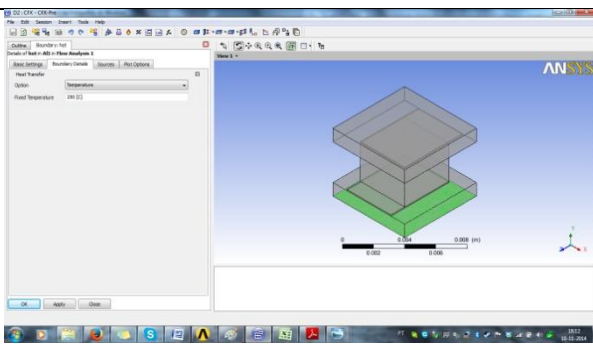


13 – Em *Argument Units* e *Result Units* insere-se as unidades das variáveis em questão. Logo em *Argument Units* (temperatura) mete-se 'K' de Kelvin e *Result Units* (condutividade térmica) 'W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>' (W/mK). Em *Coordinate* insere a temperatura e em *Value* a respetiva condutividade térmica.

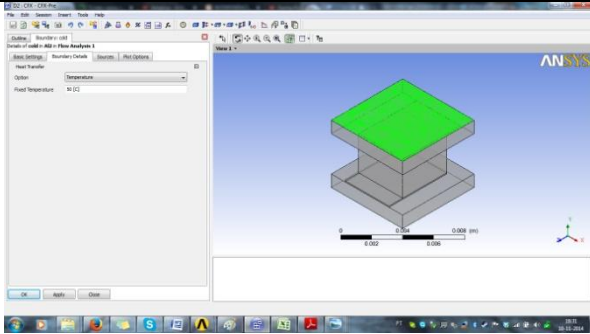
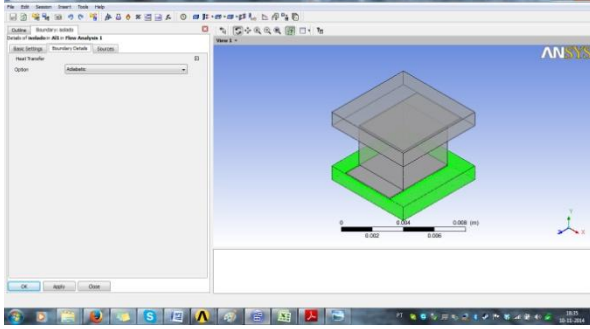
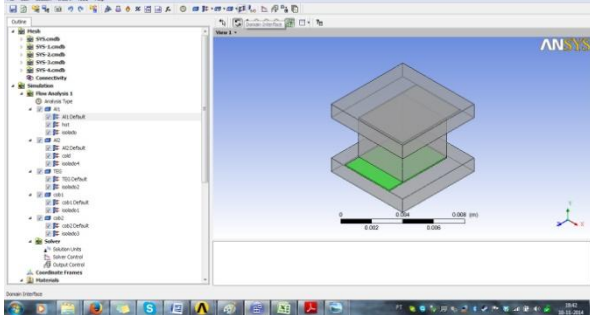
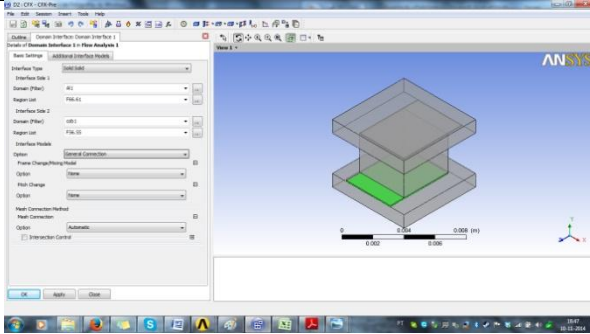
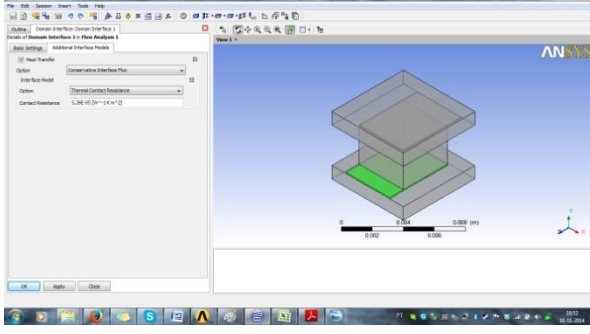


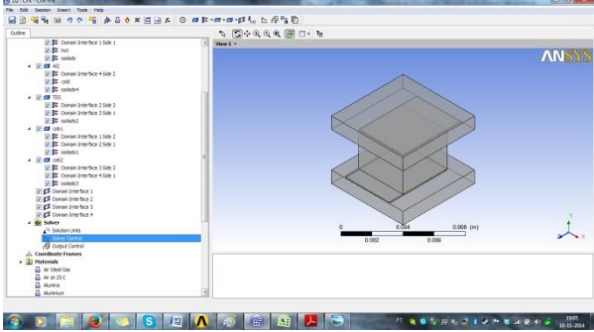

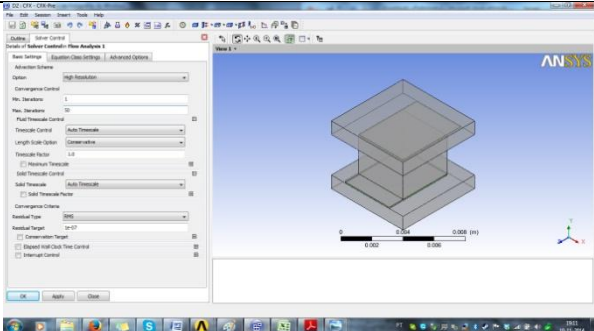
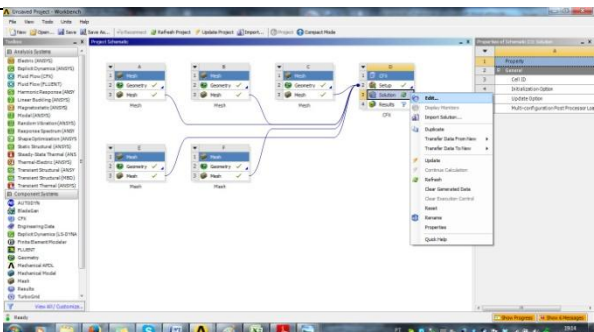

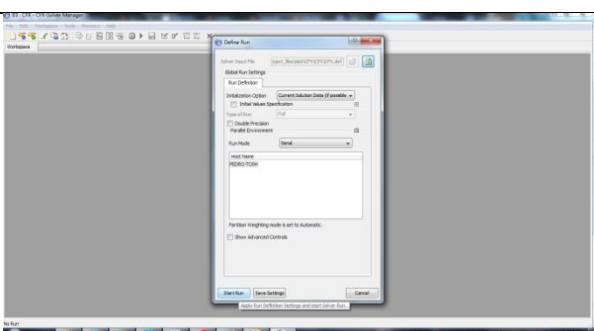
14 – Após se ter inserido as funções, no ANSYS CFX, torna-se necessário ligar as mesmas a expressões que as definem. Para isso vai se *Expressions* (🔧) -> *Insert*.

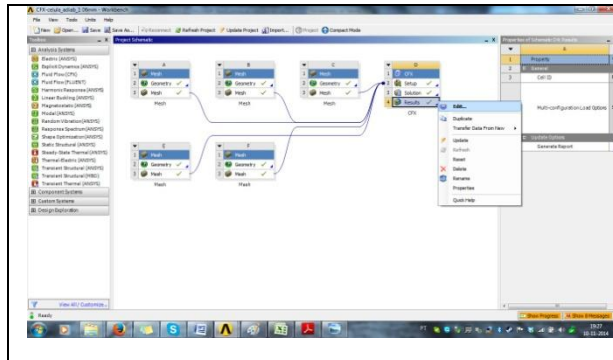
	<p>15 – Para cada função, escreve-se o seu nome e de seguida entre parêntesis ‘T’, que significa que varia com a temperatura. Por exemplo: <math>CondAl(T)</math>. Para cada um dica-se, naturalmente, <i>Apply</i>.</p>
	<p>16 – Passa-se então inserir os materiais: <i>Materials</i> (🧪) → <i>Insert</i> → <i>Material</i> (🧪).</p>
	<p>17 – Em <i>Basic Settings</i>, define-se o estado termodinâmico como Sólido.</p>
	<p>18 – Em <i>Material Properties</i>, insere-se a massa molar, densidade e calor específico. Na condutividade térmica, dica-se na no botão ‘<i>Enter expression</i>’ e escreve-se o nome da respetiva expressão. Repete-se este procedimento até todos os materiais estarem definidos.</p>
	<p>19 – Depois de terem definidos os materiais e todas as suas propriedades, vão se definir sólidos que constituem a célula. Em <i>Default Domain</i> (🧪), clica-se e com o botão do rato direito e <i>Edit</i>.</p>


	<p>20 – Em <i>Basic settings</i>, seleciona-se em <i>Location</i> a peça em questão, <i>Domain Type</i>-&gt;Sólido e em <i>Material</i> o material. No final Clica-se em <i>Apply</i> e <i>OK</i>. Repete-se este procedimento até estarem definidas todas as peças que constituem a célula termoeletrônica.</p>
	<p>21 – Estando as peças definidas, passa-se para a imposição das condições de fronteira para cada peça. Para isso vai-se ao objeto em questão e com o botão do rato direito: <i>Insert</i>-&gt;<i>Boundary</i>(). Neste caso vai-se definir primeiro as condições de fronteira para a alumina.</p>
	<p>22 – Em <i>Basic Settings</i>, define-se a face de provém a fonte de calor.</p>
	<p>23 – Em <i>Boundary Details</i>, impõe-se uma temperatura de 250°C. Para confirmar clica-se em <i>Apply</i> e <i>OK</i>.</p>

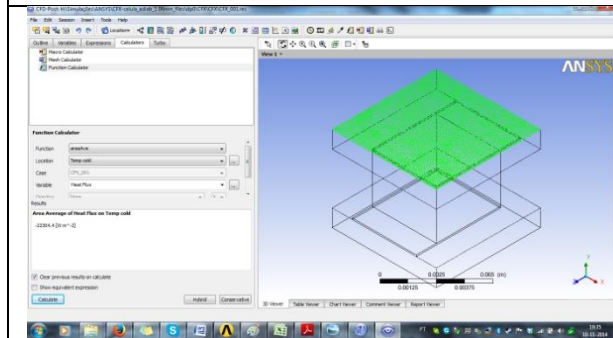



	<p>24 – Para o outro solido de alumina, define-se a face fria (saída do fluxo de calor). Em <i>Basic Settings</i> escolhe-se a face e nos e nos <i>Boundary Details</i> a temperatura, 50°C.</p>
	<p>25 – Depois de se terem definidas a face quente e fria da célula, estabelece-se as faces que estão em contacto com o exterior (ar) adiabáticas para cada peça. Em <i>Basic Settings</i> escolhe-se as faces e em <i>Boundary Details</i> a opção adiabática.</p>
	<p>26 – Após, a definição das faces fria e quente e isolar termicamente a célula, falta somente estabelecer as interfaces de contacto. Para isso, na parte superior do ecrã clica-se em <i>Domain Interface</i> ( ).</p>
	<p>27 – Em <i>Basic Settings</i>, no <i>Interface Type</i> escolhe-se <i>Solido-Solido</i> e no <i>Interface Side</i> define-se o os sólidos e as faces em contacto.</p>
	<p>28 – No separador <i>Additional Interface Models</i>, insere-se a opção <i>Heat Transfer</i>, e em <i>Option</i> escolhe-se <i>Thermal Contact Resistance</i> e assim, impõem-se o valor da resistência de contacto. Repete-se este procedimento até estarem definidas todos as interfaces de contacto.</p>

	<p>29 – Depois de todas as condições de fronteira estarem impostas falta somente, estabelecer as opções de cálculo de interações. À esquerda do ecrã, clica-se em <i>Solver Control</i>().</p>
	<p>30 – Em <i>Basic Settings</i>, impõem-se um número máximo de iterações 50 e um <i>Residual Target</i> de <math>1 \times 10^{-7}</math>. Com isto está terminado o <i>Setup</i> da simulação e fecha-se a janela.</p>
	<p>31 – No <i>Workbench</i>, vai-se a <i>Solution</i>().</p>
	<p>32 – Escolhe-se o modo que deve correr o cálculo e depois clica-se em <i>Start Run</i> para dar início ao processo de iteração.</p>



33 – Depois de ter terminado o processo de cálculo, no *Workbench*, clica-se em *Results*().

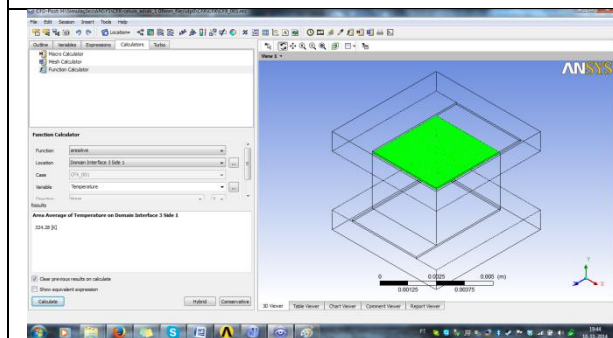


34 – Para determinar a Potência térmica: No separador *Calculators* vai-se a *Function Calculator*():

*Function*->*areaAve*

*Location*->face de saída

*Variable*->*Heat flux*



35 – Para determinar as temperaturas nas faces do telureto de Bismuto: No separador *Calculators* vai-se a *Function Calculator*:

*Function*->*areaAve*

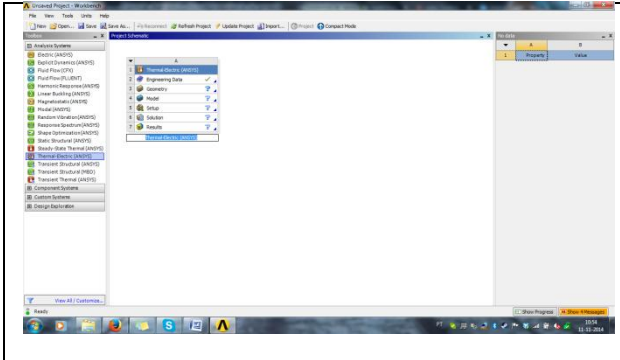
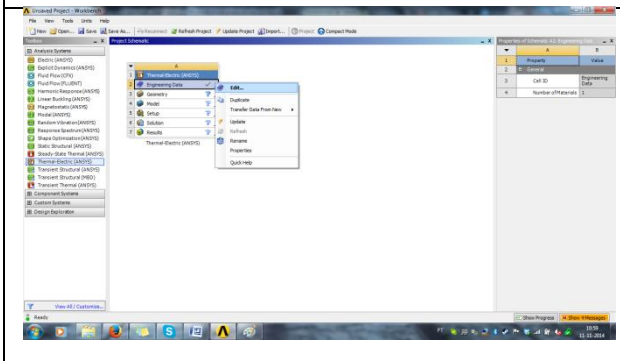
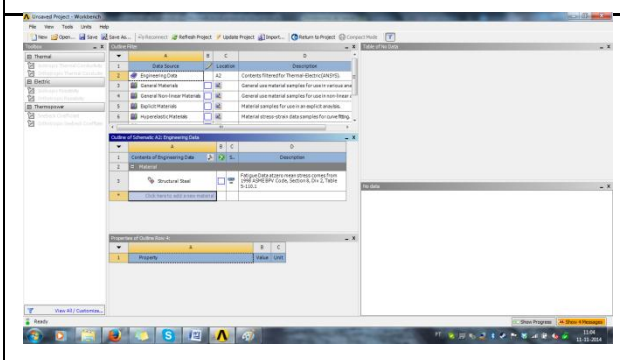
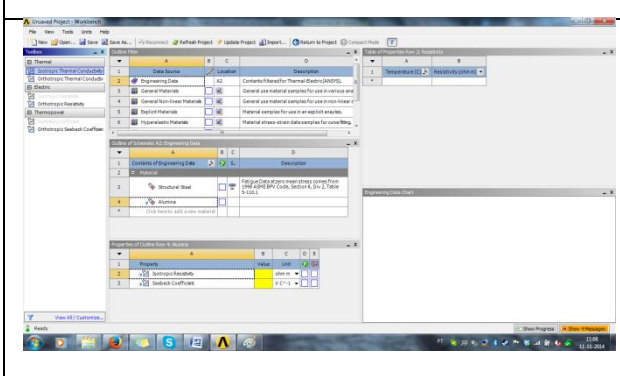
*Location*->face fria ou quente do telureto de bismuto

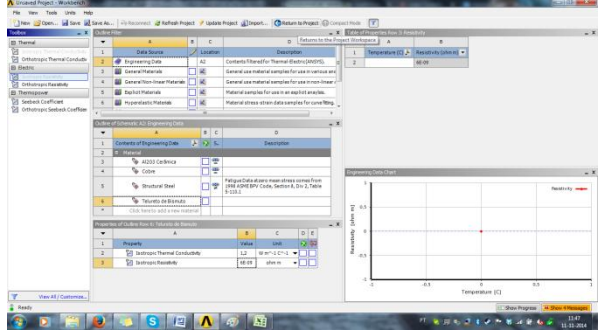
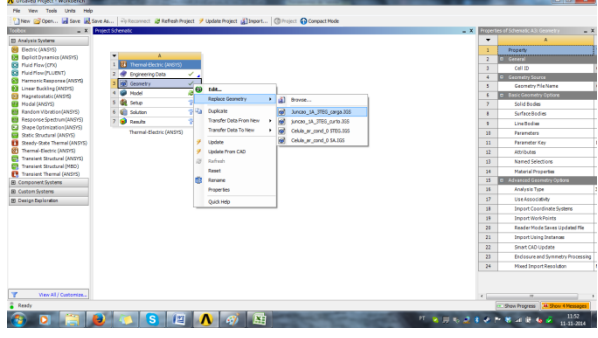
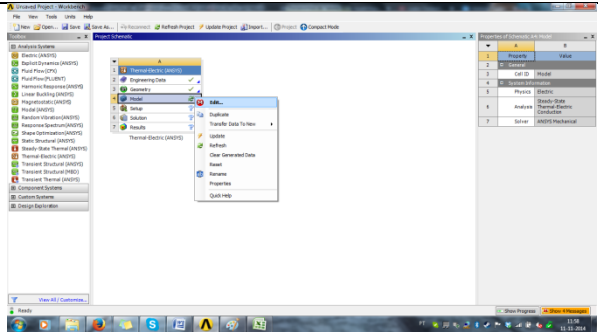
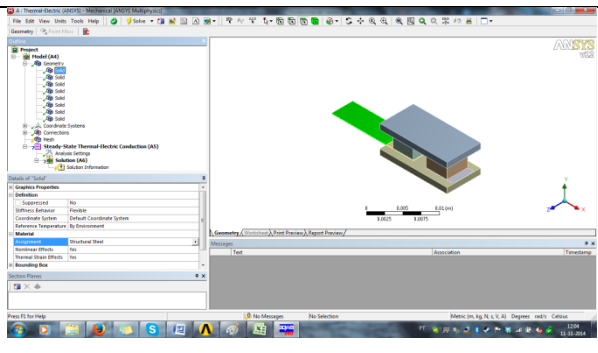
*Variable*->*Temperature*

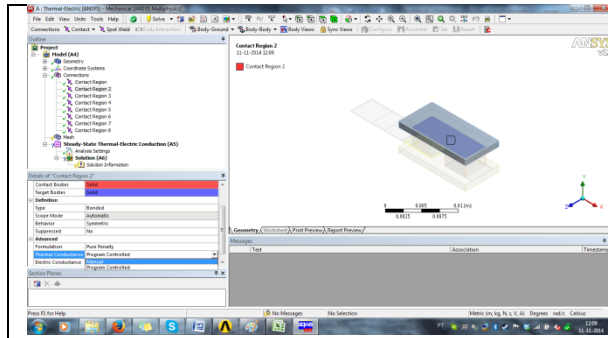


## ANEXO III – METODOLOGIA PARA REALIZAÇÃO DE UMA SIMULAÇÃO NO ANSYS TE DE UMA JUNÇÃO TERMOELÉTRICA.

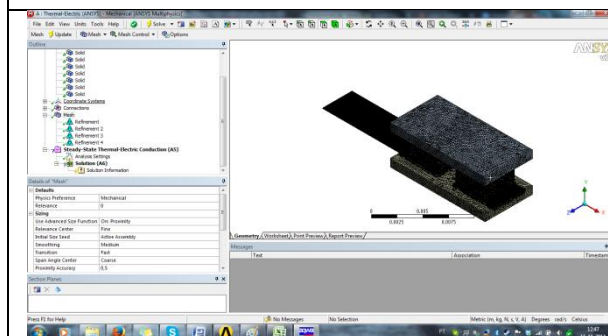
Neste anexo, apresenta-se a metodologia para a construção do modelo termoeletrónico de uma junção no ANSYS TE. Nesta simulação inclui-se o elemento de carga elétrica na junção.

	<p>1 – No ANSYS Workbench, no separador <i>Analysis Systems</i>, faz-se duplo clique <i>Thermal-Electric</i> (🔌).</p>
	<p>2 – Primeira coisa a fazer é editar o <i>Engineering Data</i> (📁), pois é aqui que se vão inserir os materiais e as suas propriedades.</p>
	<p>3 – Dentro da pasta <i>Engineering Data</i>, insere-se primeiro o nome do Material.</p>
	<p>4 – Na <i>Toolbox</i> (à esquerda do ecrã), insere-se as propriedades ao material que se quer ter em conta na simulação. Neste caso: Condutividade térmica, Resistividade elétrica e Coeficiente de Seebeck.</p> <p>A material que se escolhe para a carga é indiferente, o que conta se tem de ter em</p>

	<p>conta é a sua resistividade.</p>
	<p>5 – Depois de se ter adicionado todos os materiais e as suas propriedades, clica-se em cima no botão <i>Return to Project</i> (↩) para voltar ao Workbench.</p>
	<p>6 – Da mesma maneira que as metodologias anteriores, importa-se a geometria a partir do Workbench e gera-se a mesma em <i>Geometry</i> (📐).</p>
	<p>7 – No <i>Workbench</i>, clica-se em <i>Model</i> (📦).</p>
	<p>8 – No separador <i>Geometry</i> (📐) define-se o material para cada peça da junção.</p>



9 – No separador *Connections* (🔌), define-se para cada interface as resistências de contacto térmicas e elétricas. Para isso, vai-se abaixo em *Advanced Details*, e nas parcelas *Thermal* e *Electric Conductance* escolhe-se a opção *Manual* para se poder inserir o valor dessas variáveis manualmente. Impõem-se os valores para todos os contacto menos o cobre-carga.



10 – A malha (🔲) tem as seguintes imposições:

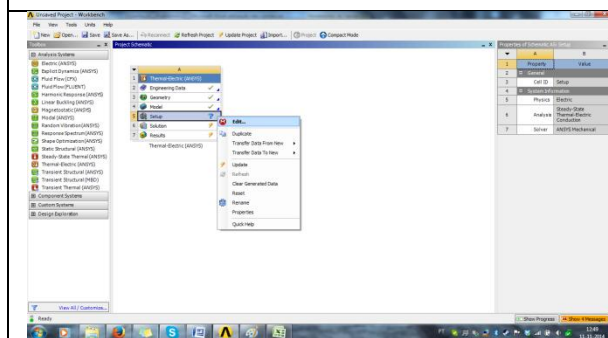
*Use Advanced Size Function-> Proximity*

*Relevance Center-> Medium*

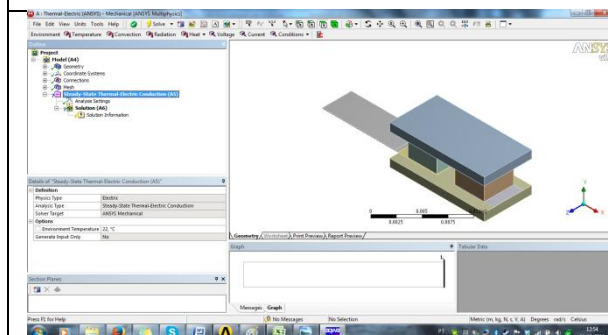
*Num Cells Across Gap-> Standard (3)*

Inserir *Refinement* (🔍) nas faces de contacto alumina-cobre e telureto de bismuto-cobre.

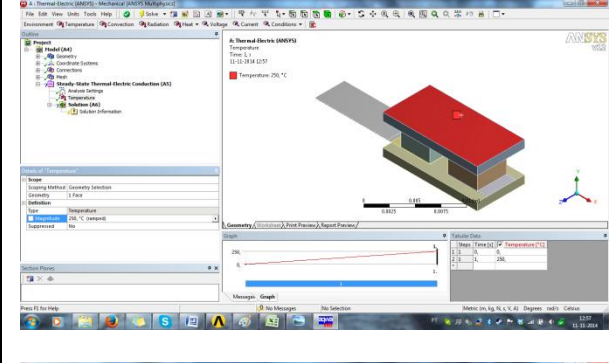
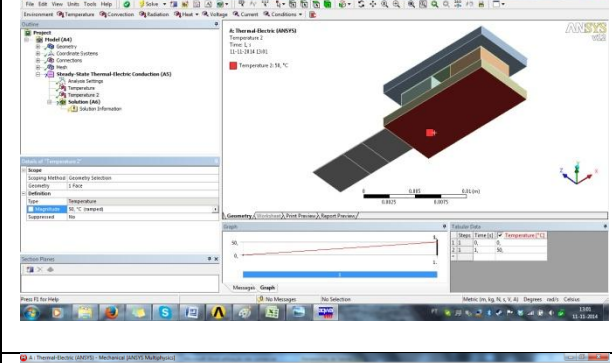
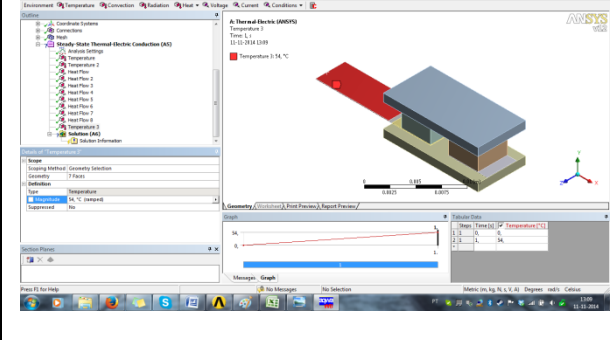
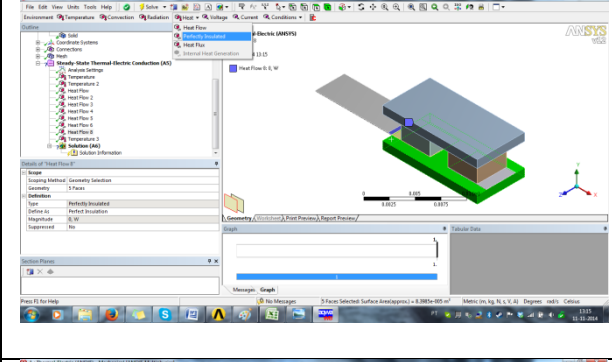
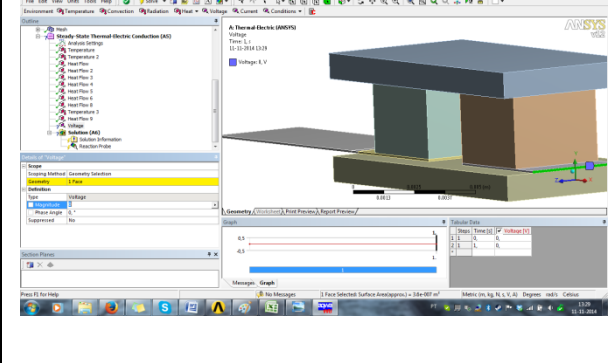
Tendo sido feito a malha, pode-se voltar então ao *Workbench*.

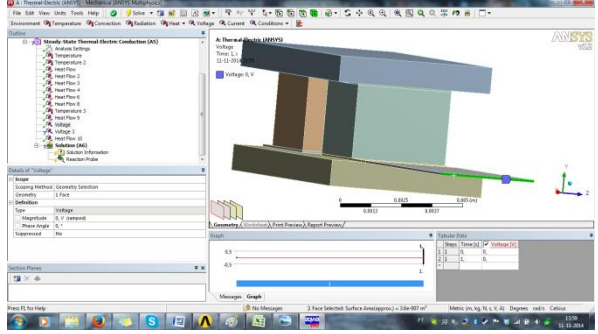
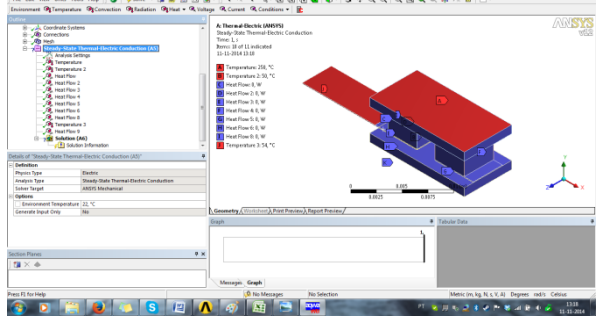
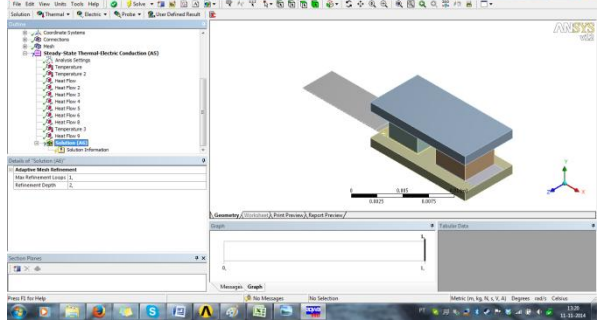
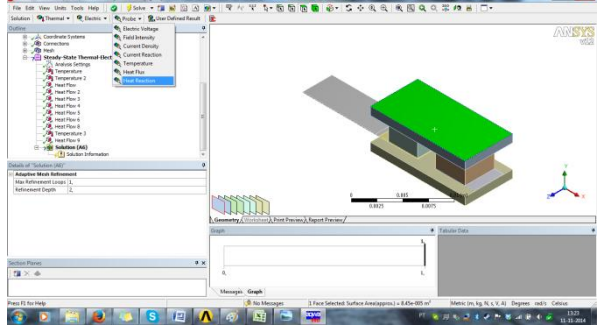
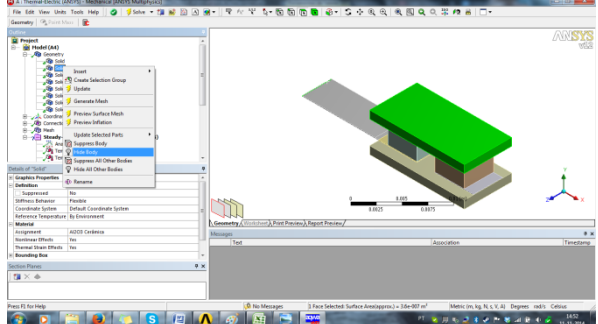


11 – No *Workbench*, vai-se então agora editar o *Setup* (🔧) da simulação.

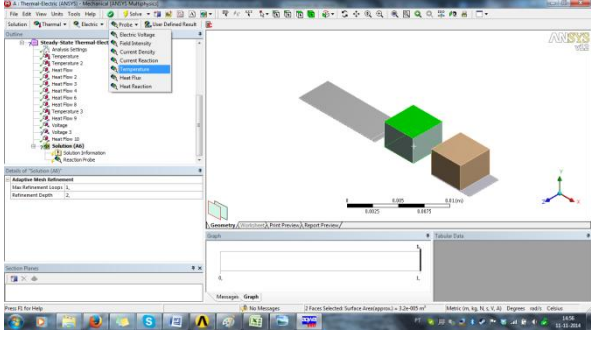
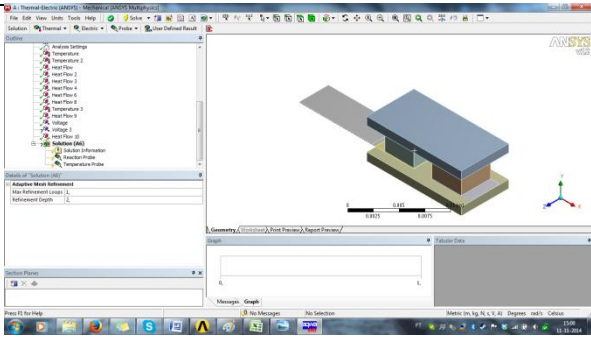


12 – Ao clicar no separador *Steady-State Thermal-Electric Conduction* (📁) aparece automaticamente na barra de ferramentas superior as condições de fronteira.

	<p>13 – Para definir a face quente da junção, seleciona-se a face superior da alumina, clica-se em <i>Temperature</i> (ícone de termômetro) e insere-se o valor da temperatura. Neste caso, 250°C.</p>
	<p>14 – Para definir a face fria da junção, seleciona-se a face inferior da alumina, clica-se em <i>Temperature</i> e insere-se o valor da temperatura. Neste caso, 50°C.</p>
	<p>15 – Para que a junção não sobreaqueça, torna-se necessário definir uma temperatura as faces da carga para dissipar o calor para o exterior. Deixando somente um pequena dimensão na zona de contacto carga-cobre adiabática.</p>
	<p>16 – Define-se as restantes faces que estão em contacto com o exterior termicamente isoladas. Isto é, seleciona-se as faces para cada objeto e na barra de ferramentas superior clica-se em <i>Heat&gt; Perfectly Insulated</i> (ícone de parede isolada). Não esquecer em definir a face contacto carga-cobre como adiabática também.</p>
	<p>17 – De forma a gerar uma corrente elétrica no modelo, é necessário impor uma tensão (de 0V) nos seus terminais. O primeiro terminal:</p> <p>Seleciona-se a face de saída do cobre (que não esta em contacto com a carga) e clica-se em <i>Voltage</i> (ícone de bateria), na barra de ferramentas.</p>

	<p>18-Seleciona-se de seguida a face de saída da carga e dica-se em <i>Voltage</i>, na barra de ferramentas para se aplicar uma tensão de 0V.</p>
	<p>19 – Desta maneira, estão então definidas todas as condições de fronteira do modelo.</p>
	<p>20 – Ao clicar em <i>Solution</i> (🔍) (à esquerda do ecrã) aparece na barra de ferramentas superior as opções das variáveis que se querem calcular.</p>
	<p>21 – Para inserir o cálculo da potência térmica: vai-se á barra de ferramentas superior e clicka-se em <i>Probe</i> (🔍)-&gt;<i>Heat Reaction</i> e seleciona-se o local que se quer calcular a potência.</p>
	<p>22 – Para se impor o cálculo das temperaturas á face do telureto de bismuto, tem que se primeiro ocultar as restantes peças de forma a se poder selecionar as suas faces. Em <i>Geometry</i>, clicka-se na respetiva peça e com o botão do rato direito escolhe-se a opção <i>Hide</i> (💡) para ocultar a peça. Para mostrar as</p>



	<p>peças todas basta ir á mesma opção <i>Show All Bodies</i>(💡).</p>
	<p>23 – Seleciona-se as duas faces do telureto de bismuto e em <i>Solution</i>, clica-se em <i>Probe-&gt;Temperature</i>.</p>
	<p>24 – Para mandar correr a simulação basta agora clicar em <i>Solve</i>(⚡) na barra de ferramentas. Depois da simulação ter ocorrido, basta no <i>Solution</i> clicar na respetiva variável que se mandou calcular durante o <i>Setup</i>.</p>

## ANEXO IV – ARTIGO SUBMETIDO PELO GRUPO DE TRABALHO AO *JOURNAL OF ELECTRONIC MATERIALS*

### Analysis of the Effect of Module Thickness Reduction on Thermoelectric Generator Output

F.P. Brito<sup>1\*</sup>, L. Figueiredo<sup>2</sup>, L. Rocha<sup>2</sup>, A.P. Cruz<sup>1</sup>, L. M. Goncalves<sup>2</sup>, J. Martins<sup>1</sup>, M. Hall<sup>3</sup>

<sup>1</sup> University of Minho, Dept. Mechanical Engineering, Guimarães, Portugal

<sup>2</sup> University of Minho, Dept. Industrial Electronics, Guimarães, Portugal

<sup>3</sup> University of Texas at Austin, Dept. Mechanical Engineering

\* francisco@dem.uminho.pt

#### Abstract

Conventional Thermoelectric Generators (TEGs) used in applications such as exhaust heat recovery are typically limited in terms of power density due to their low efficiency. Additionally, they are generally costly due to the bulk use of rare earth elements such as Tellurium. If less material could be used for the same output, then the power density and the overall cost per kW of electricity produced could drop significantly and make TEGs a more attractive solution for energy harvesting of waste heat.

The present work assesses the effect of reducing the amount of thermoelectric (TE) material used (namely by reducing module thickness) on the electric output of conventional Bismuth Telluride thermoelectric generators. Commercial simulation packages such as ANSYS and bespoke modelling have been used to model the thermoelectric generators to various degrees of detail. Effects such as the variation of thermal and electrical contact resistance, component thickness and the effect of using an element supporting matrix (e.g. eggcrate) instead of having air conduction in void areas have been assessed.

It was found that indeed it is possible to reduce the use of bulk TE material while retaining a convenient output. However, effects such as thermal contact resistance were found to be increasingly important as active TE material thickness was decreased.

#### Keywords:

Thermoelectric Generators; TEG modelling; module geometry; contact resistance; thermal modelling; power maximization.

#### Introduction

Since the late nineteenth century humankind has been using fossil fuels to produce power, namely for transport purposes. Fortunately the known fuel resources have been updated and have been increasing at a higher rate than we are using them, by new discoveries and new fuel energy sources such as shale oil,

shale gas or tar sands. But even so, these resources are limited and frequently extracted from politically unstable countries raising supply security concerns. Moreover, the pollution emissions (HC, CO, NO<sub>x</sub>, PM) and greenhouse gases (GHG) emissions (CO<sub>2</sub>) associated with their use have been increasing world wide albeit stringent legislation reducing the allowable emissions per vehicle to levels much lower than 50 years ago (100 times lower in the case of pollutants and half in the case of CO<sub>2</sub> and fuel consumption, [1] has been issued. For the last 50 years researchers have been developing Internal Combustion (IC) engines in the search for lower pollutant and GHG emissions and higher efficiency of running. However, the IC engine is still a machine with a modest (<50%) overall efficiency, wasting a lot of energy through cooling and hot exhaust gases [1]. **Erro! A origem da referência não foi encontrada..** The 2<sup>nd</sup> Law of Thermodynamics limits the overall energetic efficiency, but we are still a long way from the truly efficient engine.

Current IC engines still waste a large amount of energy through cooling (at 90°C) and exhaust gas enthalpy (between 300 and 900°C). Ideally, a significant part of this heat should be transformed into useful work. It is important to specify the temperature at which the waste heat is exhausted as this temperature level is a means for establishing the potential for work ( $W_{max}$ ) production through:

$$W_{max} = Q_i \left( 1 - \frac{T_0}{T_i} \right) \quad (1)$$

Where  $Q_i$  is the heat lost at  $T_i$  and  $T_0$  is the atmospheric (reference) temperature.

Looking at the temperatures of the waste energy transporting fluids from an IC engine, the potential (the term between brackets of the above equation) for work recovery from the cooling liquid is 0.18 (assuming  $T_0 = 25^\circ\text{C}$ ), while the same calculation yields 0.61 for an exhaust temperature of 500°C. This shows that it is 3.5 times more advantageous to harvest the same amount of thermal energy from the exhaust gases than from the cooling fluid. Even at 250°C the potential of work recovery from heat is 0.43, still a significant value.

There are several methods for converting heat into work, but most of them involve the use of thermal machinery such as those used in thermodynamic Rankine or Stirling cycles. Rankine or, more commonly for low temperature applications, Organic Rankine Cycles (ORC) use very small turbines where expanding vapour makes them rotate and produce work or electricity. Stirling cycles are also external combustion engines which uses waste heat to expand gases against pistons inside cylinders, producing mechanical power. These thermodynamic cycles have the advantage of being efficient [2-5] but they require a lot of space and are mechanically complex and somehow fragile, which makes them problematic for vehicle applications. Moreover, they are difficult to downsize for light vehicle applications.

Recent motorcars have been transformed into some kind of hybrid machines where electricity production is carefully managed. Full hybrids have electric motor/generator enabling them to recover energy from braking but at the same time have a profusion of electricity-driven devices that put a strain on the electric system, such as electric A/C, electric water pump, electric steering, etc. When the car is running, the electricity has to be generated from the engine power, reducing its overall efficiency. This is the case where it would be advantageous to produce electricity from the engine waste, namely from the exhaust gas enthalpy. Ruling out thermodynamic cycles, the solution seems to rely on a simple system for heat recovery into electricity, such as the ThermoElectric Generators (TEG).

TEGs provide a simple way of harvesting some of the waste enthalpy of the exhaust gases. They have no moving parts, they are reliable and possess a good packaging capability. Unfortunately current TEG have some drawbacks such as their typically low efficiency and low tolerance for high temperatures, where



they ought to perform best. Although state-of-the-art TE modules using nanostructured materials and exploring phenomena such as quantum confinement are claiming efficiencies above 10% [20, 23]. Major OEMs like Honda [21] GM [26] Ford [25] and BMW [24] have been testing this technology, some with targets of 5% improvements in fuel economy. Efforts are being made to overcome the power density and cost restraints of TEGs through the use of materials which are more abundant than Telluride based modules (and therefore cheaper) and which can withstand higher operating temperatures increasing the thermodynamic recovery potential. This is the case of Magnesium Silicide, Zinc Antimonide, Skutterudite and Half Heusler based modules. Several companies have been aiming to develop real world exhaust heat recovery applications with these promising materials, but they still pose difficulties such as their chemical (e.g. oxidation) and/or physical (e.g. sublimation) instability. A more basic and readily available solution would be to seek an optimization of current commercially available module materials, such as those based in Bismuth Telluride. The present paper is focused on this approach and aims to show that if very low thermal resistance heat paths are present up to the active thermoelectric material junctions, really it is still possible to tune module geometry (namely by reducing thickness) so that a substantial increase in power density and material savings could be achieved.

### **TEG principle of operation**

TEGs are based on the Seebeck effect. The creation of an electrical potential across parts of an electrically conductive material that are at different temperature is caused by the thermal energy of the valence electrons; the kinetic energy of these free electrons allows them to migrate toward the colder part more readily than the colder electrons migrate to the warmer part. The colder part of this n-type material (where electrons are dominating over holes) is therefore more negatively charged than the warmer part, resulting in electric potential. An equivalent phenomena occurs with holes in a p-type material, where the colder part of the material becomes more positively charged.

In a TEG, a p-type material is serial connected with a p-type material, in such way that generated voltages are summed. A few milivolts could be generated with this junction. To achieve a usable voltage, many of this thermoelectric junctions are connected in series, and a few volts could be generated in a TEG.

### **Factors affecting TEG power output**

The electric power output depends on the open circuit voltage ( $V_0$ ) generated by the module, on its total electric conductance (or its opposite, the total internal resistance,  $R_i$ ) and on the load resistance  $R_L$ . For maximum power conditions,  $R_L$  should match the internal resistance, so in reality, for maximum power conditions only  $V_0$  and  $R_i$  really matter.

The open circuit voltage depends on the Seebeck coefficient ( $\alpha$ ) and on the temperature differential across the hot and cold junctions of the active TE material. This differential will be proportional to the thermal resistance of the TE material (or inversely proportional to its thermal conductance). Here geometric properties (cross section and thickness) as well as material properties (thermal conductivity,  $k$ ) play a role in conductance. The electric resistance is dependent on the same geometric properties and on the electric resistivity of the material ( $\rho$ ) and contacts ( $\rho_c$ ). The figure-of-merit of a TE material (namely the one that's been non-dimensionalized by temperature,  $ZT$ ) is a widely used parameter to characterize the potential of a given TE material to generate power and incorporates all these material-dependent properties ( $\alpha$ ,  $k$ ,  $\rho$ ) which affect electric power output. Much research has been put on finding materials which display ever increasing  $ZT$  figures. Notable advances have been observed over the last few years in this respect, notably with nanostructured materials displaying promising  $ZT$  figures [6]. But unfortunately, the road towards the availability of many materials for mass production has shown to be

very slow, namely due to the difficulty of upscaling small laboratory samples to full scale applications and to mass production [23].

### Thermal resistance of module

The thermal resistance of the various components of the module determine the thermal power crossing it and the several temperature drops between the hot and the cold source temperatures. The objective would be to have this dropping to occur mostly across the TE material, since the Seebeck voltage is a function of the temperature differential across the hot and cold junctions of the TE material ( $\Delta T_{TEG}$ ). Therefore, the thermal resistance of the TE material should be highest, but the resistance of the remaining material layers and interfaces should be lowest, otherwise, it will deprecate  $\Delta T_{TEG}$ . In this respect, research focuses on finding way to reduce the portion of thermal conductivity which is not directly dependent on electric conductivity (the lattice thermal conductivity). Furthermore, the thermal resistance is proportional to material thickness and inversely proportional to cross sectional area, but so is electric resistance, so the tuning of these parameters is sensible regarding the TE elements. For instance, reducing the thickness of the TE elements will be good for lowering electric resistance but it will impact  $\Delta T_{TEG}$ , because the lower thermal resistance will increase thermal output and tend to smooth the temperature asymmetry between the hot and cold sources. But this will only happen if the available hot source energy is low and the other thermal resistances are high enough to significantly deprecate  $\Delta T_{TEG}$ . It may be possible to optimize these parameters.

Regarding the other material layers, their thickness should be as small as possible and their area and thermal conductivity as high as possible. The modules need an external electrically insulating substrate which normally is made of high conductivity ceramics such as aluminium oxide (Alumina,  $Al_2O_3$ ). When this substrate makes up the structure of the module, keeping the TE junctions in place, it cannot be too thin. There are also modules [19] which rely on a polymeric matrix (e.g. eggcrate) as the structure involving the elements and keeping them in place. In this case, the ceramic substrate is not structural and it may be as thin as possible or even inexistent if the surface in contact with the modules is electrically insulating.

An additional layer of TE modules is the array of metal conductors providing the series electric connection between TE elements. This layer usually has small thermal and electrical resistance since materials such as copper and aluminium are normally used. The eggcrate matrix displays a thermal conductivity which is low but slightly higher than that of the air. The global effect of having lower ceramic substrate thicknesses and an eggcrate matrix instead of air separating the elements has never been analysed in detail, that is why the present work briefly analyses it.

Thermal contact resistance is still another term affecting global thermal resistance. In thick TE modules it will be a small portion of the overall resistance and it may be neglected. However, once smaller and smaller TE element thicknesses are used, it will start being a non-negligible term. It depends on the thermal contact resistivity,  $R_c$  (or its opposite, the thermal contact conductance  $h_c$ ) and on the area of contact. The contact conductance coefficient will depend on the conditions of the contacting pair, such as the materials' surface finish, hardness and contact pressure, as well as the interstitial medium (air, vacuum, water, oil, thermal grease). These properties influence the compliance between the surfaces and the existence of contact porosities which act as heat transfer bottlenecks [7]. The presence of surface contaminants (grime, oxidation), as well as other, more complex phenomena involving nano-scale interaction and quantum physics phenomena [9] also affect thermal contact conductance. This is more evident when solders or other kinds of physical junctions are present, sometime with density gradients. Electric contact resistance is also calculated from a physical constant (electric contact resistivity,  $\rho_c$ )

multiplied by the contact area. It is partially related to the thermal contact resistance being also affected by most of the aforementioned factors, among others.

An obvious way of reducing contact resistances is to increase the contact area as much as possible. Another one is to find interface films which improve material compliance. Although there are works analysing contact resistance in a broad scope [8, 9], there is a lack of works focusing on thermoelectric generators applications with a few exceptions, mainly dealing with simulation [10 - 12].

The thermal resistance of heat exchangers is also a factor. The authors have been exploring the concept of using heat pipe based heat exchangers as a way for reducing thermal resistance, to passively downgrading excess temperature events and to optimize variable thermal load operation [13-15].

## Modelling and Simulation

### *Thermal modelling*

The thermal modelling was implemented in four different approaches with increasing degrees of complexity:

1. 1D heat transfer solved with equivalent electric circuit;
2. 1D heat transfer solved with equivalent electric circuit and additionally using thermal conduction shape factors for compensation of the 2D effects (shape factor calculated in ANSYS CFX for each geometry, valid for multiple conditions);
3. Detailed ANSYS CFX heat transfer modelling;
4. ANSYS THERMAL-ELECTRIC (ANSYS TE) which incorporates heat transfer and electro-thermal effects in the same solver.

On one hand, the more detailed approaches cannot be used as easily in bulk as the simpler ones for testing wide ranges of conditions. On the other hand, the few calculations made with these detailed models allow to assess and validate the broader set of results obtained with the more simplified modelling.

#### **1. 1D heat transfer with equivalent electric circuit**

The first approach is the simplest, providing the direct calculation of the heat transfer rates and the temperatures within the whole module domain, with the iteration process being needed solely to update the materials' properties with each new calculation of the temperature field.

A Bismuth Telluride TEG element can be observed in Figure. 1. While most of the heat transfer is unidirectional, it can be seen that there will be multi-directional heat flux in some regions. A first approach is to neglect this effect and consider unidirectional heat flux only, perpendicular to the several interfaces. Thus the heat transfer between the heat source and the heat sink (also called the hot and cold sources) at temperatures  $T_{Hot}$  and  $T_{Cold}$ , respectively, can be easily modelled by accounting for the thermal resistances of the heat paths. After calculating the total equivalent thermal resistance,  $R_{Total}$ , the thermal power,  $\dot{Q}$ , can be obtained for a given temperature difference between the hot and cold sources:

$$\dot{Q} = \frac{T_{hot} - T_{cold}}{R_{total}} \quad (2)$$

The heat will cross the various layers of the TEG element of Figure 1. Assuming 1D heat flow, there will be different parallel flow paths with dissimilar thermal resistances.

These thermal flow paths have been identified in Figure. For instance, in path 4 the heat crosses all material layers through conduction in this order: lower Alumina substrate, lower copper conductor, thermoelectric element (bismuth telluride), upper metal (copper or aluminium) conductor and upper Alumina substrate. On the contrary, in the paths 1 and 5 the heat will only cross the lower Alumina ceramic substrate, the air and the upper substrate. Paths 2 and 3 will include a metal conductor layer at either the lower or the upper region of the element.

As it can be seen, the only layer in series is the Ceramic substrate. The total equivalent resistance can be easily determined by adding the resistances of the hot and cold sides of the alumina substrate ( $R_{h\_Alumina}$ ,  $R_{c\_Alumina}$ ) and the equivalent resistance of the parallel section ( $R_{eq}$ ):

$$R_{Total} = R_{h\_Alumina} + \frac{1}{\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_3} + \frac{1}{R_4} + \frac{1}{R_5}} + R_{c\_Alumina} \quad (3)$$

With  $R_1$  thru  $R_5$  representing the resistances for each heat path. The resistance through conduction is calculated from the thickness,  $L$ , the section area ( $A$ ) and the thermal conductivity of the material ( $k$ ):

$$R_{material} = \frac{L}{A * k} \quad (4)$$

The contact resistance between two interfaces is obtained through the inverse of the product between the contact area,  $A_{Contact}$  and the thermal contact conductance,  $h_{Contact}$ :

$$R_{contact} = \frac{1}{A_{contact} * h_{contact}} \quad (5)$$

Then the expressions of  $R_1$  thru  $R_5$  are:

$$R_1 = R_5 = \frac{L}{A * k_{air}} \quad (6)$$

$$R_2 = R_{Contact_{Al/Cu}} + R_{h\_metal} + R_{Air} = \frac{1}{A_{contact_{Al/Cu}} * h_{Contact}} + \frac{L_{h\_metal}}{A_{h\_metal} * k_{h\_metal}} + \frac{L}{A * k_{air}} \quad (7)$$

$$R_3 = R_{Air} + R_{c\_metal} + R_{Contact_{Cu/Al}} = \frac{L}{A * k_{air}} + \frac{L_{c\_metal}}{A_{c\_metal} * k_{c\_metal}} + \frac{1}{A_{contact_{Cu/Al}} * h_{Contact}} \quad (8)$$

$$\begin{aligned}
 R_4 &= R_{Contact_{Al/Cu}} + R_{h\_metal} + R_{Contact_{Cu/TE}} + R_{TE} + R_{Contact_{TE/Cu}} + R_{c\_metal} + R_{Contact_{Cu/Al}} \\
 &= \frac{1}{A_{contact_{Al/Cu}} * h_{contact}} + \frac{L_{h\_metal}}{A_{h\_metal} * k_{h\_metal}} + \frac{1}{A_{contact_{Cu/TE}} * h_{contact}} + \frac{L_{TE}}{A_{TE} * k_{TE}} \\
 &\quad + \frac{1}{A_{contact_{TE/Cu}} * h_{contact}} + \frac{L_{c\_metal}}{A_{c\_metal} * k_{c\_metal}} + \frac{1}{A_{contact_{Cu/Al}} * h_{contact}}
 \end{aligned} \quad (9)$$

The total thermal resistance  $R_{total}$  can be obtained by substituting these expressions into expression. 3, and used for the calculation of the total thermal power,  $\dot{Q}$ , using expression. 2. All individual temperature differences across a given thermal resistance can be calculated from the thermal power crossing that heat path:

$$\Delta T = \dot{Q} * R \quad (10)$$

This gives values of temperature in each location for the first iteration. Then other iterations will be made until convergence is attained.

## 2. 1D heat transfer using conductive Shape Factors

The 1D heat transfer with equivalent electric circuit is a direct method but also has a greater propensity to error, because it does not deal realistically with 3D heat transfer effects. For instance, due to the low thermal conductance of the air, it is likely that most of the heat reaching the Alumina substrate through section 1, 3 and 5 will actually deflect to heat paths 2 and 4 instead of flowing across the air to the opposite part of the module. Similarly, most of the heat reaching the metal conductor through heat path 2 will deflect towards heat path 4. These phenomena are not accurately treated by merely performing series and parallel 1D heat transfer calculations, especially when section areas and thicknesses vary significantly across the object [7], as in the present case.

Shape Factors,  $S$ , which in reality correspond to equivalent section area to thickness ratios for a given geometry, can be used in such cases for calculating the conductive thermal resistance in a way similar to expression 4:

Shape factors are available for a limited set of geometries. But they can be easily computed for custom

$$R = \frac{1}{S * k} \quad ; \quad S = \left( \frac{A}{L} \right)_{eq} \quad (11)$$

geometries using numerical tools such as ANSYS CFX. This was made for the Alumina substrate and the metal conductors, as illustrated in Figure 2. The process was to impose a given temperature differential at the heat input and output surfaces and calculating the resulting thermal power. The shape factor can be easily determined by substituting expression 10 into 11 and rearranging:

$$S = \frac{\dot{Q}}{\Delta T * k} \quad (12)$$

Since it is a geometric factor, the shape factor is valid for a given geometry and for practical terms, it does not vary with the temperature field (only a marginal variation may be observed due to the temperature

dependence of conductivity which, when integrated across the geometry, may yield very slight differences in  $S$  for different temperature differences between hot and cold sources).

Apart from the calculation of  $S$  for the substrate and the metal conductors, the calculations using this method are even simpler than the 1D heat transfer described previously. In fact, all the heat will be channelled through the solids. Therefore, the total thermal resistance will simply be the sum of the conductive resistances of each material (either calculated through expression 4 or 11) and the contact resistances.

It is important to note that with the use of a shape factor it is only possible to model the insulated case (no heat transfer across the air can be simulated). However, it is likely that this solution will provide a very good accuracy for the treatment of 3D solid conduction effects while keeping the overall computation effort low. An analytical way of calculating shape factors would render this solution even more attractive. This might be possible to do by employing methods similar to those used for the heat transfer calculations with extended surfaces [7]

### 3. Detailed ANSYS CFX heat transfer modelling

Simulating the whole heat transfer problem in a partial differential equation solver such as ANSYS CFX to obtain the temperature field and the thermal power output is a still more accurate method than the previously described one. Such a tool solves the generalized energy equation [7] locally. Unlike 1D models, temperatures and properties are allowed to vary locally. However, these methods are also much more computationally intensive.

This tool was used sparingly for calculating a few number of cases in order to validate the aforementioned simplified models or in situations in which those were insufficient to assess phenomena such as the heat transfer through the air or detailed heat transfer through radiation. Naturally, care need be taken with meshing, as well as the setting of suitable boundary conditions and the definition of material/interface properties with temperature dependency. Figure 3 illustrates the usefulness of this approach, as it can be seen that the heat flux is not uniform due to the influence of the metal conductor and the thermoelectric leg located at the opposite interface. In fact, there is a larger heat flux density at the centre (where the thermoelectric leg is located) and to the side where the metal conductor is located.

The total thermal power crossing the leg is obtained by calculating the area average of the heat flux and multiplying it by the heat transfer section.

#### *Electric modelling*

All 3 forms of simulation TEG's presented so far, aim to simulate solely the thermal behaviour of the TEG and thus obtain estimations of global and local thermal resistances, thermal powers and interface temperatures. Once obtained, these values can be used as inputs for a common electric model to calculate the electrical behaviour of a TEG working as a generator. The electrical behaviour of a thermoelectric generator (TEG) is especially characterized by its internal electrical resistance ( $R_i$ ), Seebeck coefficients ( $\alpha_p$  and  $\alpha_n$ ) and open circuit voltage ( $V_0$ ), and when an load closes the electric circuit, the load voltage ( $V_c$ ), the current ( $I$ ) and the power ( $P$ ). Normally, the aim is to maximize the power output of the TEG device, in which case the relevant variable is the maximum power ( $P_{max}$ ) for a given temperature differential. For this case,  $V_c$ ,  $I_{P_{max}}$  and  $P_{max}$  are calculated taking into account the theorem of the maximum power transfer, presented below.

To calculate the internal electrical resistance of a module it is necessary to calculate the various components which contribute to it. The electrical resistance of a junction is composed of four resistive

elements, the resistance of the P-type and N-type thermoelectric elements (in the present case, doped Bismuth Telluride elements), the metal conductor resistance (e.g.: aluminium/copper) and the electrical contact resistance between the bismuth telluride and metal as show in figure 4. The total junction resistance will then be multiplied by the total number of junctions ( $N_{\text{junctions}}$ ):

$$R_{\text{Total}} = N_{\text{junctions}} * (R_N + R_P + R_{\text{Metal Total}} + 4 * R_{\text{Contact}}) \quad (13)$$

The electrical resistance of any solid conductor can be calculated from its electric resistivity ( $\rho$ ), section area ( $A$ ) and length ( $L$ ) of the solid conductor through which the current crosses:

$$R_{\text{Material}} = \frac{\rho_{\text{Material}} * L}{A} \quad (14)$$

The electric resistivity ( $\rho$ ) of the material varies with temperature. In the present approach and for the sake of simplicity, the resistivity was considered as the one corresponding to the average temperature, although a more detailed discretization with a temperature weighted approach would be possible. Also 3D effects due to non-uniform current flux have been neglected in all models (except in ANSYS TE, where it is built-in). These effects are expected to increase when  $L$  is very small, compared with other dimensions.

The electrical contact resistance of interfaces (metal – P-type and metal – N-type) is not considered to vary with temperature and is calculated using the following expression, with each TEG junction displaying four of these resistances ( $\rho_c$  is the contact resistivity):

$$R_{\text{Contact}} = \frac{\rho_c}{A} \quad (15)$$

The open voltage of a TEG can be calculated using one of the following equations, depending on whether the  $T_{\text{hot}}$  and  $T_{\text{cold}}$  temperatures of the faces of bismuth telluride material are considered to differ for P-type and N-type. This can happen if the properties of the thermal resistivity of the bismuth telluride P-type are different from N-type:

$$V_0 = N_{\text{junctions}} * (\alpha_p - \alpha_n) * (T_{\text{hot}} - T_{\text{cold}}) \quad (16)$$

$$V_0 = N_{\text{junctions}} * [(\alpha_p) * (T_{\text{hot}_P} - T_{\text{cold}_P}) - (\alpha_n) * (T_{\text{hot}_N} - T_{\text{cold}_N})] \quad (17)$$

With the addition of a resistive load ( $R_{\text{load}}$ ) to the thermoelectric generator (TEG), the electrical circuit of the generator is closed, a current is induced and the voltage at the terminals of the thermoelectric generator drop to the so-called load voltage ( $V_c$ ), because part of the generated voltage ( $V_0$ ) drops within the module itself due to the internal resistance of the TEG. This voltage can be calculated through the following expression.

$$V_c = \frac{R_{load} * V_0}{(R_{load} + R_{iTotal})} \quad (18)$$

The resulting power and current at load are calculated as follows:

$$P = \frac{V_c^2}{R_{load}} = \frac{R_{load} * V_0^2}{(R_{load} + R_{iTotal})^2} ; \quad I = \frac{V_0}{(R_{load} + R_{iTotal})} \quad (19)$$

The calculation of the maximum electric power is obtained according to the theorem of maximum power transfer, in which the power output is maximized when the load resistance equals the internal resistance of the thermoelectric generator ( $R_{iTotal} = R_{load}$ ). This is a particular case of expression 19:

$$P_{Max} = \frac{V_0^2}{4 * R_{iTotal}} ; \quad I_{PMax} = \frac{V_0}{2 * R_{iTotal}} \quad (20)$$

#### 4. ANSYS THERMAL-ELECTRIC (ANSYS TE)

The last approach is the most complete of the methods used in the present work for simulating TEG's and to validate the results obtained by other methods used. For this approach the ANSYS Workbench software version 12 was used, using the Thermal – Electric (ANSYS TE) simulation package, which is part of ANSYS Mechanical. ANSYS TE allows simulating locally the thermal and electrical effects, including the heat sources/sinks due to Joule effect, Seebeck, Peltier and Thomson effects [16].

For the present analysis, a complete thermoelectric junction (Alumina, metal conductor, Bismuth telluride P-type and N-type and surrounding medium, e.g.: Egg Crate, air or none) were imported from a CAD tool to ANSYS TE. Temperature dependent properties such as the thermal and electrical properties and the Seebeck coefficients were defined. The thermal [ $W/m^2 K$ ] and electrical [ $S/m^2$ ] contact conductance values were also defined when needed. For meshing, a maximum value size and/or a number of divisions was set for mesh elements. Subsequently, the boundary conditions were defined as depicted in Figure 5.

They consisted on hot side temperature ( $T_{hot}$ ) at the upper surface of the upper alumina, cold side temperature ( $T_{cold}$ ) at the bottom surface of the lower alumina and all remaining faces defining the limits of the domain were defined as thermally insulated. This is valid considering that there is thermal symmetry between contiguous TEG junctions. A reference electric potential of 0 volts was set to one of the tips of the lower conducting metal (Low Potential) as a reference, while the voltage was measured at the tip of the opposite conductor metal (Open Circuit  $V_o$ ). Remaining external faces of the materials were subjected either to thermal conduction with air/eggcrate or thermally insulated (in case no surrounding medium was considered).

The open voltage is read at the conductor tip opposing the tip to which zero voltage has been set. To calculate the overall or maximum power using expressions 19 and 20, it is necessary first to calculate the internal resistance of the junction/module. This is done by adding a known load to the simulation closing the circuit and then measuring the closed circuit voltage. To add a load resistance, it is sufficient to add a fictitious resistor consisting of an object with resistivity and dimensions such that its total resistance will be the one desired for the simulation (similar to the estimated internal resistance). This resistor will be in contact with one of the outer tips of the metal conductor where the Open Circuit Voltage ( $V_o$ ) is measured, while its opposite side will also have 0V, as depicted in Figure 5.



To calculate the internal resistance of the module ( $R_i$ ) it is necessary to use the value of the open voltage ( $V_o$ ) of a simulation without an load, and the value of current ( $I_L$ ) and voltage consumed by the load ( $V_L$ ) in one simulation.

$$R_{i_{practical}} = \frac{V_o - V_L}{I_L} \quad (21)$$

Then it is possible to calculate the maximum and overall power value as demonstrated in the previous expressions 19 and 20.

### ***Simulation conditions***

For the present work, two different thermoelectric modules from market were used for the simulation of a large range of conditions: RS 6937116 and Hi-Z HZ-14. The reason for testing two different module types is that they represent two construction philosophies. RS modules have thick alumina substrate plates which are structural (they keep the TE legs in place) and so the Alumina thickness cannot be easily reduced without compromising module integrity. HZ-14 modules have an eggcrate matrix structure involving the legs. This supporting matrix allows to reduce the thickness of the electric insulator plates or even eliminate them if the modules are attached to electrically insulating surfaces. The base properties of the modules are summarized in Table 1.

Temperature-dependent thermal properties such as thermal conductivity [7] and electrical properties such as resistivity and Seebeck Coefficients for P and N type elements were added to the material library of ANSYS and to the 1D modelling data. Most of these properties were those of the manufacturer, when available. The data was especially detailed in the case of Hi-Z modules [19].

## **Results and discussion**

### **RS Modules**

Figure 6 compares the four different simulation approaches (unidirectional, shape-factor, ANSYS CFX and ANSYS TE). Maximum electrical power ( $P_{max}$ ) is plotted as function of the temperature difference between the hot and the cold faces and for three different  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  module thicknesses (0.5mm, 1mm, and 3mm). It can be seen that all four approaches provide similar results (maximum differences to the most accurate method were below  $\pm 5\%$ ). The 1D heat transfer (heat flux unidirectional) solved with the equivalent electric circuit is the method least approximated to the most accurate method (ANSYS TE). The difference between the methods increases slightly as the TE material thickness decreases.

It can be seen that raising the temperature difference will cause, naturally, a higher Electrical Power output in line with eq. 16 due to Seebeck voltage increase. Although the influence of the TE material

thickness will be discussed further ahead, it can already be seen here that the maximum output is obtained for a thickness which is not the lowest nor the highest.

Figure 7 shows the temperature distribution across the different material layers/interfaces of a module with the standard thickness of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  (3.0mm). The main drop in temperature occurs across the bismuth telluride. The contact resistance between the interfaces (recall eq. 15) represents the second highest resistance, but it is globally much lower than the former. Figure 7 also reveals that the thermal resistance of the alumina substrate and copper conductors is negligible overall (1%). As the main goal towards improving thermoelectric generators is the maximization of the temperature difference across the faces of the thermoelectric material, a high  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  thermal resistance is beneficial for the system.

Reducing the thickness of the Bismuth telluride material will reduce its thermal resistance and so the temperature fall across it will be lower, while a higher temperature fall across the rest of the module will increase (such as the contact between materials). Figure 8 illustrates this, as it represents the results for a slimmer thickness of 0.5mm  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  (the thin blue line still shows the temperature profile of Figure 7 for comparison). When comparing it with the standard thickness module (3.0 mm) it can be noticed that there is a stronger temperature fall across the contacts between materials associated with a much lower thermal resistance of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . This is translated by a fall in the temperature difference across that material from 184 to 132°C. Most of this loss was due to the thermal resistance of the junctions across different materials, now totalling 29% of the total temperature difference, from a minute 7% in the standard case. This much lower temperature difference across the thermoelectric material will significantly reduce the Seebeck Voltage (eq. 16) but it will also decrease the electrical resistance (eqs 13, 14). The maximum electrical power output will depend on both these parameters, according to eq. 20. In the present case it can be seen, by recalling the results presented in Fig. 6 that the electric power globally increased when reducing the TE thickness from 3 to 0.5mm. This means that the lower internal resistance effect has prevailed over the lower Seebeck voltage effect, globally increasing power output.

Figure 9 presents the maximum electrical output power plotted as function of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  thickness, for three different alumina substrate thicknesses (0.5 mm, 1 mm or 3 mm) and three different contact heat transfer coefficients,  $h_c$  which is the reciprocal of contact resistivity (no contact resistance,  $h_c=\infty$ ; reasonably good contact,  $h_c = 19000 \text{ W/m}^2\text{K}$ ;  $h_c = 6600 \text{ W/m}^2\text{K}$ ). The latter two cases correspond to a thermal grease interface (silicon oil) and a real module contact resistance deduced from the data of one manufacturer, respectively. A fixed electrical contact resistivity of  $6 \times 10^{-9} \Omega \cdot \text{m}^2$  was considered for all cases.

It can be seen in Fig 9 that decreasing the thickness of alumina for any case, causes an increase of the electrical power, but this effect is negligible unless the contact heat transfer coefficient ( $h_c$ ) is high.

The increase of  $h_c$  has a very positive influence on power, because the total available  $\Delta T$  will be less depreciated by the resistances external to the TE material. On the other hand, it can be seen that decreasing the TE elements thickness has increasing, then decreasing effect in power. This is due to two reciprocal effects: 1) A thinner  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  element has a lower temperature drop across it, since its thermal resistance is lower, thus the Seebeck voltage will be lower affecting negatively the power. 2) A thinner  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  element will also have lower electrical resistance (lower total length of TE elements, see black thick curve) and therefore affecting positively the power. The combination of these two effects, yields the curves of figure 9 with an optimum point (maximum power) being obtained for the most advantageous combination of these two factors influencing power through eq. 20.

Having thus observed that the thermal contact resistance has a strong effect in the electrical power output, a plot was made analysing  $h_c$  as a function of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  elements thickness. A constant value of  $6 \times 10^{-9} \Omega \cdot \text{m}^2$  was used for the electric contact resistivity. It can be seen that the  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  thickness which maximizes power depends on  $h_c$ . So, being able to increase  $h_c$  (which is the same as decreasing contact resistance) would not only allow to obtain higher maximum electric powers, but also reduce the optimum thickness of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , thus reducing the amount of thermoelectric material used in the TEG.

The value of electrical contact resistivity ( $\rho_c$ ) also plays an important role in the maximum electrical power that a TEG can provide, as shown in eq. 13. Figure 11 illustrates precisely that. It shows the influence of  $\rho_c$  and  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  thickness in the maximum electrical power of TEG. A constant value of  $19000\text{W/m}^2\text{K}$  was used in the contact heat transfer coefficient. If a lower value of contact resistivity could be obtained, a lower optimum thickness of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  would be obtained.

Figure 12 plots the relationship between specific power (power per unit volume of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  material) and efficiency (maximum electric power output per thermal power input) as function of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  thickness. A contact heat transfer coefficient  $h_c=19000\text{W/m}^2\text{K}$ , a contact resistivity  $\rho_c= 6\times 10^{-9}\ \Omega.\text{m}^2$  and an alumina thickness of 1 mm were used to plot Fig 12. The power per unit volume increases nearly indefinitely as the thickness of bismuth telluride decreases. It can be observed that the Maximum point of Power per volume is achieved for very small thicknesses ( $\approx 0.2\text{ mm}$ ). It is important to refer that this maximum power/volume thickness does not correspond with the point of maximum electrical power seen in figures 10 and 11. However, for thicknesses below 0.3 mm, it can be seen that efficiency is very small ( $< 1\%$ ).

The efficiency always increases with the Bismuth telluride thickness increase. Unfortunately, this will be made at the expense of a lower power (when increasing thickness above 0.8mm) and increased material cost. So it seems that higher efficiency is not by itself a guarantee of maximized output. In other words, more efficiency means less thermal power used for a given output but not necessarily a higher output. In waste heat recovery the aim is normally to maximize electrical output not efficiency, even if it is at the expense of a higher thermal loss. When talking about waste heat recovery, the loss of heat is not really a relevant matter. Therefore, lower bismuth telluride thicknesses will increase heat usage, but down to a certain threshold it will contribute to a higher electric power.

## Hi-Z HZ-14 Module

Simulations of the RS 6937116 module were complemented using the HZ-14 module from the company Hi-Z Technology. The properties of the bismuth telluride differ depending on the material being P-type or N-type and we used the properties as specified by the manufacturer [19]. For the electric resistivity of contact between the bismuth telluride and aluminium a value of  $4.5 \times 10^{-9} \Omega \text{m}^2$  was used. For the contact heat transfer coefficient, two values were used. The value of  $6600 \text{ W/m}^2\text{K}$  (estimated from one manufacturer) was used between bismuth telluride and the aluminium conductors for some simulations, but for other simulations the value of  $19\,000 \text{ W/m}^2\text{K}$  was used, as this is commonly used when using silicon oil in the interface between two materials. For the remaining thermal contacts a value of  $19\,000 \text{ W/m}^2\text{K}$  was used.

The ANSYS Thermal-Electric (ANSYS TE) simulation allows the multiphysics simulation of various thermal and electrical variables, as well as to see their behaviour along the TEG domain. Figure 13 shows the temperature field along the TEG from the hot face (top) down to the cold face (bottom). Different temperature drops can be observed in materials with different thermal conductivities. Figure 13 refers to a thickness of 1mm of bismuth telluride with the hot face ( $T_{\text{hot}}$ ) at  $250^\circ\text{C}$  and the cold face ( $T_{\text{cold}}$ ) at  $50^\circ\text{C}$ . The thermal power absorbed in the hot face ( $T_{\text{hot}}$ ) of the junction was calculated as being  $6.145\text{W}$ , while the thermal power released at the cold face ( $T_{\text{cold}}$ ) of the junction was  $5.970\text{W}$ . The difference in power between the hot face and the cold face ( $6.145 - 5.970 = 0.175\text{W}$ ) illustrates the principle of conservation of energy and the thermal to electric energy conversion occurring in the system. This happens through the heat sources vs sinks happening inside the module due to Peltier and Joule effect.

Figure 13 also illustrates that the lower thermal conductivity of the insulating egg crate material. It is possible to perceive the lower thermal conductivity because in these materials there is the larger drop in temperature throughout the material itself.

Figure 14 shows the heating by Joule effect. Talking in terms of power and current densities, the higher the current density ( $\text{A/m}^2$ ) and the resistivity of the material, the higher will be the heating power per unit volume.

Figure 14 clearly shows that both the insulating Egg Crate and the ceramic Alumina are electrical insulators, so they do not experience the Joule effect. The aluminium metal has a very low electrical resistance so the Joule heat is very small ( $56.33 \text{ W/m}^3$ ). The bismuth telluride has a higher electrical resistance than aluminium, so this material have a stronger heating by Joule effect. In areas where current density is greater (see red hot spots in Fig 15) the heating by joule effect is also greater. Figure 15 shows the current density across the TEG junction.

Figure 15 proves that the current path is not linear because there are zones of material that have a higher current density than others. As the electrical resistance of the bismuth telluride is much higher than that of aluminium, the current density is linear in the bismuth telluride. In the aluminium material there are areas of very low current density ( $68.04 \text{ A/m}^2$ ) and areas where the current density is very high ( $1.435\text{e}6 \text{ A/m}^2$ ).

The TEG modules manufacturer by Hi-Z Technology do not have alumina as a structural media, because they have Egg Crate material (insulation) that provides physical stability and structure to the module. This material has a low thermal conductivity ( $0.1 \text{ W/mK}$ ) and is a perfect electric insulator, but does not cover the top or bottom surface of the aluminium. It would be interesting to assess the influence of reducing the thickness of alumina and see its influence on the whole output as a function of different thicknesses bismuth telluride, as shown in Figure 16.

Because the HZ14 modules only need to have alumina as an electrical insulator and not as a structural aid, three cases were studied, two with thin alumina plates and one without alumina. For each of these three cases two different contact heat transfer coefficients ( $19\,000 \text{ W/m}^2\text{K}$  and  $6\,600 \text{ W/m}^2\text{K}$ ) were modelled. The thickness of the alumina ranged from  $0.2 \text{ mm}$  and  $1.0 \text{ mm}$ . The thickness of  $1.0 \text{ mm}$  was chosen

because it is used by the module RS 6937116 also studied in this work. A 0.2 mm thick alumina was chosen to because it is the value commonly used with those modules.

As it can be seen from Figure 16, the TEG modules with the higher contact heat transfer coefficient ( $19\,000\text{ W/m}^2\text{K}$ ) generated more electricity than the modules with the lower contact heat transfer coefficient ( $6\,600\text{ W/m}^2\text{K}$ ). The same is valid for the alumina, the thicker the alumina the lower the electric power.

We can also conclude that the optimum thickness for maximum electric power generation depends on the thermal contact conductance and the thickness of the alumina. However, it may be seen that despite HZ-14 modules have 0.2 mm alumina substrate instead of 1 mm this does not seem to be much thermally relevant.

With this, we conclude that the lower the thermal resistance of the TEG module, the smaller the thickness of bismuth telluride for maximum electric power generation, up to an optimum thickness value. By reducing further than the optimum thickness a drastic reduction in the maximum electric power is obtained.

Here, some ANSYS TE simulations have also been made (big dots). The slight differences may be attributed to the higher internal resistance that ANSYS TE estimates. In fact, the existence of current hot spots (recall Fig 15) makes the total calculated electric resistance higher than the value estimated through eq. 14.

Simulations were also conducted in order to assess the influence of the medium surrounding the TE elements. These simulations compared three cases. A case where the insulating egg crate is used (real case). Another case where air is used as insulating material. Finally, a case where no insulating material is used and we assume there are no heat losses across the void space. Results can be seen in Figure 17. The 3 upper lines were calculated using 1D heat transfer simulation while the 3 lines below were obtained using ANSYS-TE. The difference between results of the two simulation methods are around 10%, mainly attributed to the differences in the calculated electrical internal resistance, as mentioned above. The differences between Egg Crate matrix (typical of HZ), air (typical of RS) or void are negligible. This means that the slightly higher thermal conductance of the matrix used by the manufacturer does not affect performance. This might vary however if modules with higher void fractions are used. That was actually the experience of another recent publication [12].

A second vertical scale was added (on the right side) where the electrical power was divided by module area, thus power density ( $\text{W/m}^2$ ) can be read in same plot. Maximum power is obtained with a thickness around 1 mm. Therefore, the thickness of this module could be decreased and the output power increased, and less thermoelectric materials (eg: bismuth telluride) would be needed per module.

In figure 18, the generated power density (Watts per  $\text{mm}^3$  of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  material) is plotted for HZ14 modules, as function of module thickness. Additionally, the efficiency of the module is plotted in the second vertical axis. The module efficiency increases with the thickness of the bismuth telluride. If the quantity of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  raw material is a relevant issue, lower thickness would increase the ratio power/volume. However, the thickness for maximum power is 1mm, which would yield a maximum of 8.5 to 10W per module or 2.2 to 2.5kW/m<sup>2</sup> of modules, maximum. Lower thicknesses would provide higher values of power per volume of TE material but would start to require huge surfaces and high heat transfer rates (due to the resulting low efficiency). , the large heat transfer rates ( $\text{W/m}^2$ ) crossing the module could be unreachable due to the resistance of the paths conducting heat to (and heat out from) the module, something which was not studied in this work.

## Conclusions

Thermoelectric Generators were modelled with various degrees of complexity to assess the viability of reducing TE element thickness as a way of cutting the usage of expensive TE material without compromising power output. The following conclusions were drawn:

- The differences between models were normally small, but increased as TE material thicknesses decreased. The various models are complementary in the sense that simpler models allow for the calculation of a broad range of conditions and for the identification of the range of interest, while more detailed models, namely multiphysics ones, may allow the refinement of the results.
- While higher TE material thicknesses tend to increase the generated voltage (by maximizing junction  $\Delta T$ ), lower thicknesses minimize overall electric internal resistance.
- It was found that really it is possible to find an optimum TE element thickness, maximizing output electric power. Thermal/electrical contact resistances play an important role in this optimization, and cannot be neglected for low thickness (sub millimetre) TE elements. However, few literature was found reporting on contact optimization in thermoelectric modules. The results of this work seem to indicate that substantial gains in power generation and reduction of costs with materials might be achieved if new technology is developed to minimize thermal and electrical contact resistances.
- For the geometries tested, the medium surrounding the elements (eggcrate matrix, air, void) did not seem to affect the results, nor did the thickness of alumina substrate, except for low TE material thickness modules.

## Acknowledgements

- Project ThinHarvest (FCOMP-01-0124-FEDER-041343 / EXPL/EMS-ENE/1023/2013) and Post doctoral grant SFRH/BPD/89553/2012, financed by FEDER funds through Programa Operacional Fatores de Competitividade – COMPETE and National funds through PIDDAC and FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia;
- Luso-American Foundation / National Science Foundation (FLAD/NSF) 2013 PORTUGAL – U.S. Research Networks Program, Project “Waste Exhaust Energy Recovery of Internal Combustion Engines”;
- Hi-Z Technology, Inc, for the information supplied regarding their modules’ properties and performance.

## References

- [1] Martins, J, “Internal Combustion Engines - 4th edition”, (ISBN: 978-989-723-033-2) Publindustria, Porto, 2013
- [2] Dai, Y., Wang, J. and Gao, L., "Parametric Optimization and Comparative Study of Organic Rankine Cycle (ORC) for low Grade Waste Heat Recovery", Energy Conversion and Management, No. 50 (2009) 576–582
- [3] Kim, K.H.; Ko, H.J. and Kim, S.W., "Exergy Analysis of Organic Rankine Cycle with Internal Heat Exchanger", International Journal of Materials, Mechanics and Manufacturing, Vol. 1, No. 1, 2013
- [4] Tuo, H., "Energy and Exergy-Based Working Fluid Selection for Organic Rankine Cycle Recovering Waste Heat from High Temperature Solid Oxide Fuel Cell and Gas Turbine Hybrid Systems", Int. J. Energy Res., No.37, 1831-1841, 2013;

- [5] Obara, S., Tanno, I., Kito, S., Hoshi, A. and Sasaki, S., "Exergy Analysis of the Woody Biomass Stirling Engine and Pem-Fc Combined System with Exhaust Heat Reforming", *International Journal of Hydrogen Energy* ; 33(9):2289-2299, 2008
- [6] P. Pichanusakorn, P. Bandaru, Nanostructured thermoelectrics, *Mater. Sci. Eng. R* 67, 19 (2010) 19–63
- [7] Incropera F.P., deWitt D.P., "Fundamentals of Heat and Mass Transfer", 3rd Ed., Wiley, 1990.
- [8] Fletcher, L. S. (1988) Recent developments in contact conductance heat transfer. *ASME Journal of Heat Transfer*, 110, 4B, 1059–1070.
- [9] Madhusudana, C. V.; Ling, F. F. (1995). *Thermal Contact Conductance*. Springer.
- [10] D. Ebling, K. Bartholomé, M. Bartel, M. Jägle, Module Geometry and Contact Resistance of Thermoelectric Generators Analyzed by Multiphysics Simulation, *Journal of Electronic Materials*, September 2010, Volume 39, Issue 9, pp 1376-1380
- [11] D.M. Rowe, G. Min, Design theory of thermoelectric modules for electrical power generation, *Science, Measurement and Technology*, IEE Proceedings, 143, 351, (1996)
- [12] Haiyan Fateh, Chad A. Baker, Matthew J. Hall, Li Shi, High fidelity finite difference model for exploring multi-parameter thermoelectric generator design space, *Applied Energy*, Volume 129, 15 September 2014, Pages 373–383
- [13] F. P. Brito, Jorge Martins, L.M. Gonçalves, Nuno Antunes, Diogo Sousa, Influence of Heat Pipe Operating Temperature on Exhaust Heat Thermoelectric Generation, *SAE International Journal of Passenger Cars - Mechanical Systems* 6(2):2013 652-664, DOI: 10.4271/2013-01-0559
- [14] F. P. Brito, Jorge Martins, Rui Sousa, L.M. Gonçalves, Temperature controlled Exhaust Heat Thermoelectric Generation, *SAE International Journal of Passenger Cars - Electronic and Electrical Systems* 561-571, 5(2):2012. DOI 10.4271/2012-01-1214
- [15] FP Brito, Jorge Martins, L.M. Gonçalves, Rui Sousa, Modelling of Thermoelectric Generator with Heat Pipe Assist for Range Extender Application, 37th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society (IECON 2011), Novembro 7-10th, Melbourne, Australia. ISBN: 978-1-61284-971-3, DOI: 10.1109/IECON.2011.6120066
- [16] ANSYS, I., 2009. *Mechanical (formerly Simulation)*. Canonsburg: Southpoint, 275 Technology Drive.
- [17] Yuxiang Ni, Thermal contact resistance between molecular systems : an equilibrium molecular dynamics approach applied to carbon nanotubes, graphene and few layer graphene, PhD Thesis, Ecole Centrale Paris (18/10/2013).
- [18] Auerkari, P. & VTT, T. M., 1996. Mechanical and physical properties of engineering alumina ceramics, Vuorimiehentie and Bergsmansvagen: Technical Research Center of Finland.
- [19] Hi-Z Technology.inc, n.d. Hi-Z Technology.inc Thermoelectric Materials - Devices - Systems. [Online] Available at: [www.hi-z.com/uploads/2/3/0/9/23090410/performance\\_calculator\\_hz-14.xls](http://www.hi-z.com/uploads/2/3/0/9/23090410/performance_calculator_hz-14.xls) [Accessed 29 06 2014].
- [20] Min, G. and Rowe, D. M., "Conversion Efficiency of Thermoelectric Combustion Systems", *IEEE Transactions on Energy Conversion*, 22- 2, June, 2007.

- [21] Mori, M., Yamagami, T., Sorazawa, M., Miyabe et al., “Simulation of Fuel Economy Effectiveness of Exhaust Heat Recovery System Using Thermoelectric Generator in a Series Hybrid”, SAE Technical paper 2011-01-1335.
- [22] BMW group corporate communications, “Press Release: Looking for the next gram”, 28 August 2011, available at:  
<https://www.press.bmwgroup.com/pressclub/p/pcgl/download.html?textId=144138&textAttachmentId=174413> (accessed October 25th 2012).
- [23] Dresselhaus, M.S., Chen, G., Tang, M.Y., Yang, R.G., et al., “New Directions for Low-Dimensional Thermoelectric Materials”. *Adv. Mater.*, 19 (2007): 1043–1053. doi: 10.1002/adma.200600527
- [24] J. Lagrandeur, D. Crane, S. Hung, B. Mazar, and A. Eder, “Automotive Waste Heat Conversion to Electric Power using Skutterudite, TAGS, PbTe and BiTe,” *Thermoelectrics*, 2006. ICT'06. 25th International Conference on. IEEE, 2006.
- [25] Harry Zervos, “Waste heat recovery systems in vehicles”, *Energy Harvesting Journal*,  
<http://www.energyharvestingjournal.com/articles/waste-heat-recovery-systems-in-vehicles-00003754.asp>
- [26] G. P. Meisner, “Skutterudite Thermoelectric Generator For Automotive Waste Heat Recovery,” 3rd Thermoelectric Applications Workshop, Baltimore, Maryland 2012.



Table 1 - Range of inputs variables from Modules RS and Hz-14

Variable	Unit	Standard	Range
Temperature of the alumina hot face	°C	-	[150;250]
		-	250
Temperature of the alumina cold face	°C	-	50
		-	50
Alumina thickness	mm	1.0	[0.5;3.0]
		None	[none;1.0]
Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub>	mm	3.0	[0.5;3.0]
		1.6	[0.2;2.0]
Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> - Seebeck Coefficient	V/K	1.9E-04	Standard value
		-1.9E-04	Standard value
		[184E-6;209E-6]	Standard value
		[-165E-6;-181E-6]	Standard value
Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> - Thermal conductivity	W/mK	1.2	Standard value
		1.2	Standard value
		[1.2571;2.1707]	Standard value
		[1.0271;1.1835]	Standard value
Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> - Electric resistivity	Ω.m	1.5E-05	Standard value
		1.5E-05	Standard value
		[1.024E-5;1.979E-5]	Standard value
		[1.187E-5;1.806E-5]	Standard value
Contact heat transfer coefficient	W/m <sup>2</sup> K	19000	[6600; ∞]
		6600	[6600;19000]
Contact resistivity	Ω.m <sup>2</sup>	6.0E-09	[0; 1.0E-08]
		4.5E-09	4.5E-09

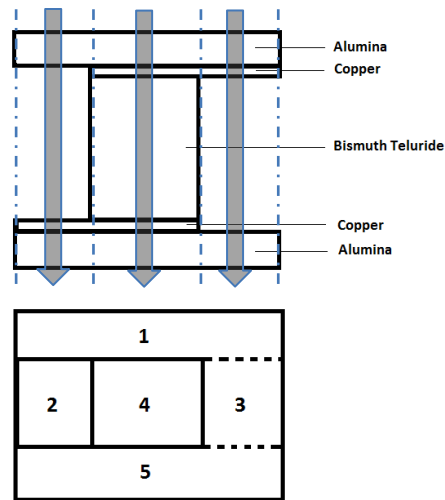


Fig.1 - Outline of a TEG with the different heat paths considered in 1D thermal modelling (front view and upper view below it)

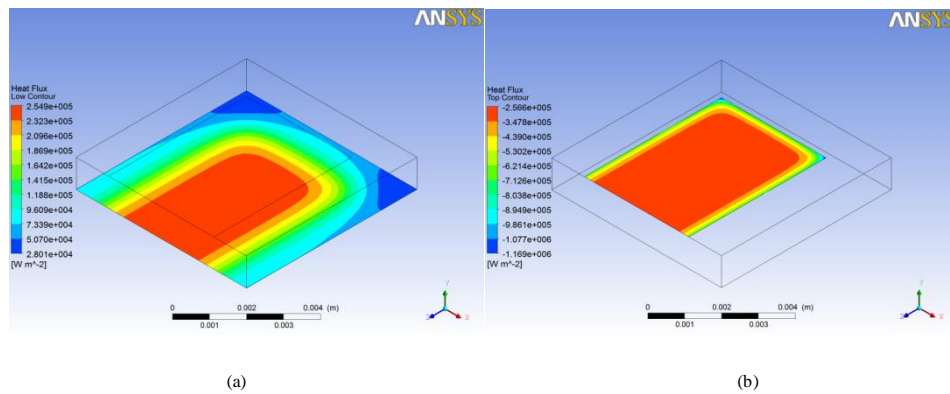


Fig. 2 – Alumina geometry used to calculate shape factor, with heat flux contour in heat outlet interface (ANSYS CFX)

(a) Alumina hot face (b) Contact face between Alumina and Copper

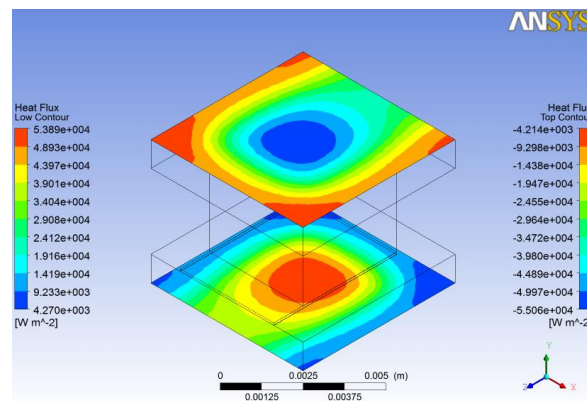


Fig. 3 - ANSYS CFX results about the heat flux behaviour on the hot and cold face of the Cell

Hot face= $250^\circ\text{C}$ ; Cold face= $50^\circ\text{C}$ ; Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> thickness= $3\text{mm}$

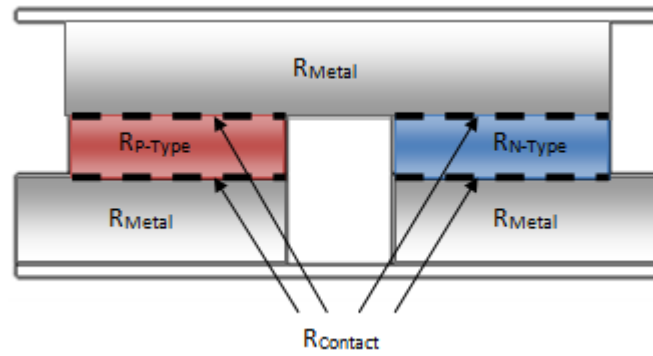


Fig. 4 - Representation of the electrical resistances of a TEG junction

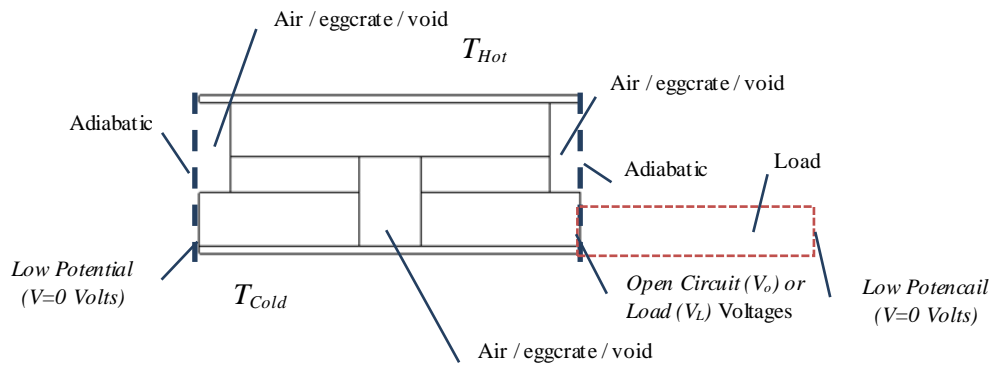


Fig. 5 - Definition of boundary conditions for ANSYS TE simulation

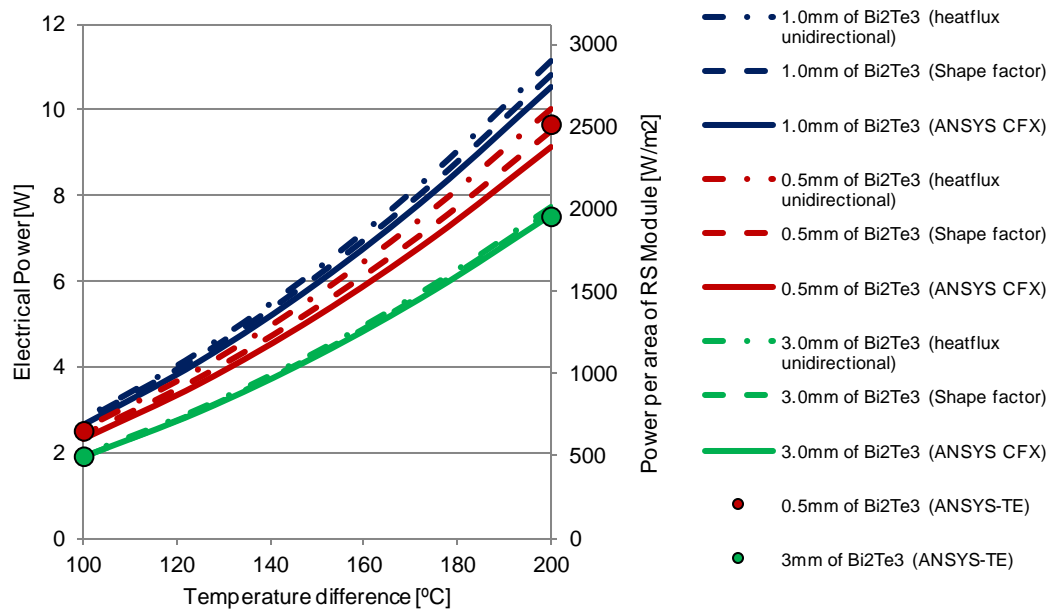


Fig. 6 - Electrical Power and electrical power per area as a function of the temperature difference, demonstrating also the validity of the diverse approaches

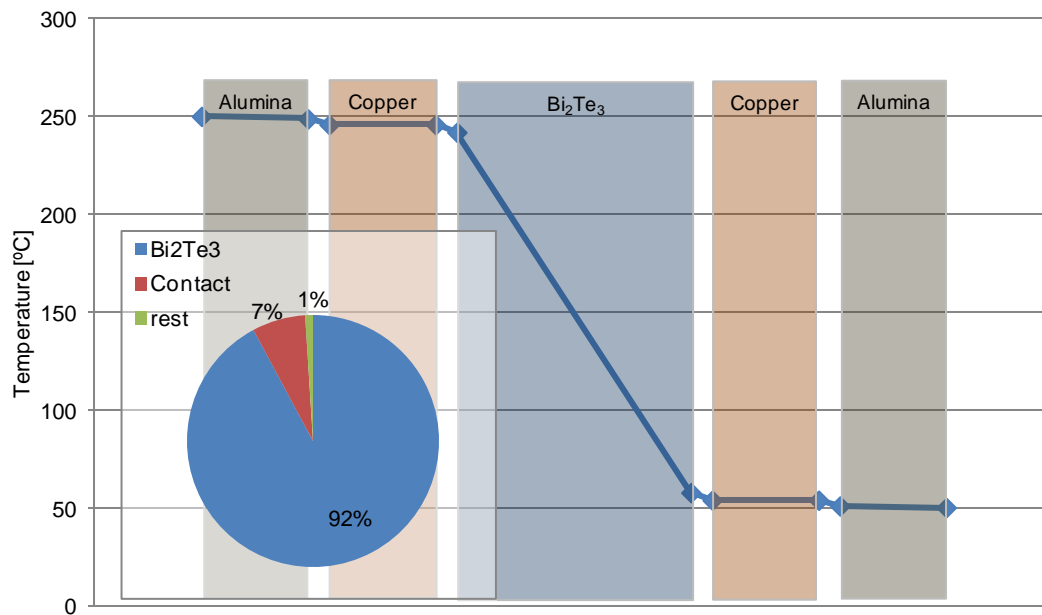


Fig. 7 - Temperature profile across module layers for standard Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> thickness (3.0 mm). Insert: % of thermal resistances

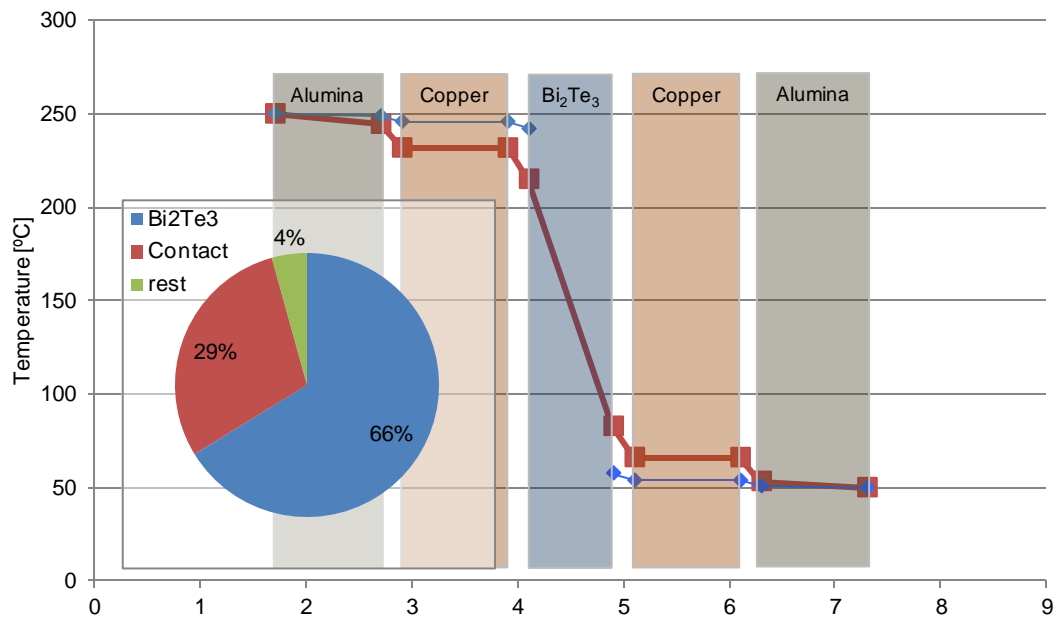


Fig. 8 - Temperature profile for a  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  thickness of 0.5 mm, Insert: % of thermal resistances

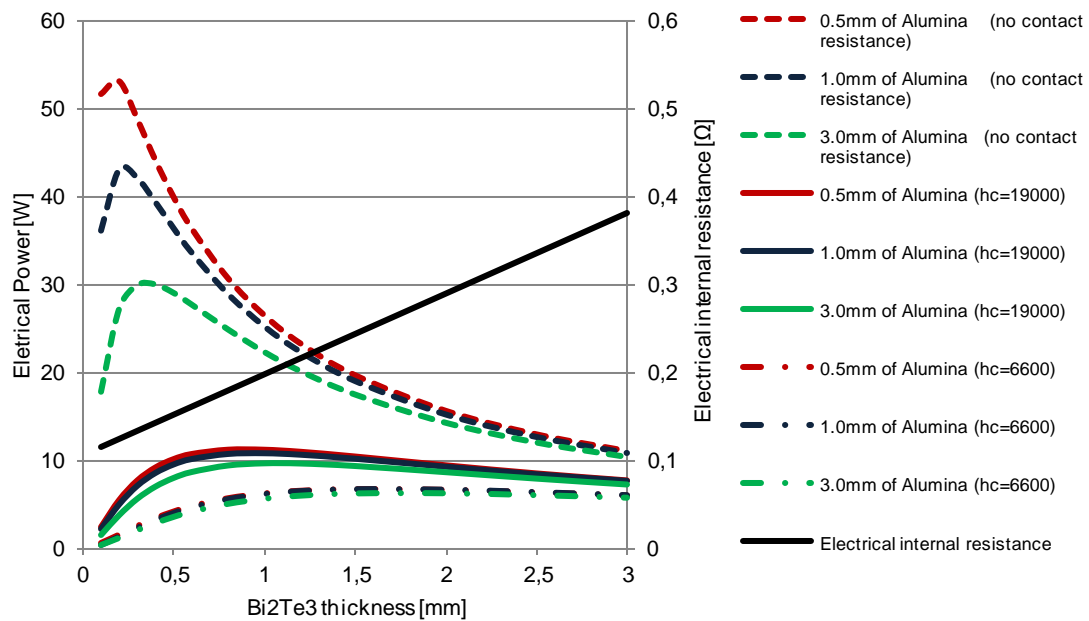
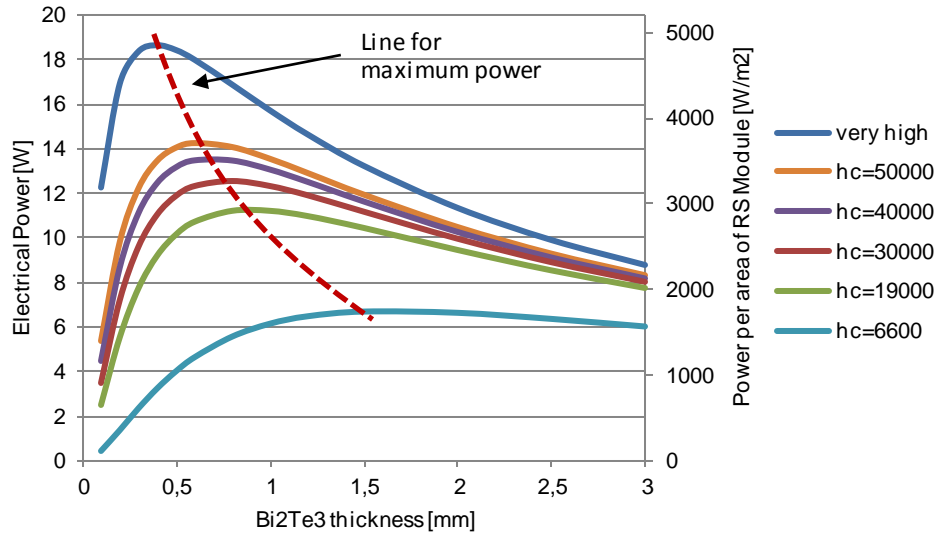
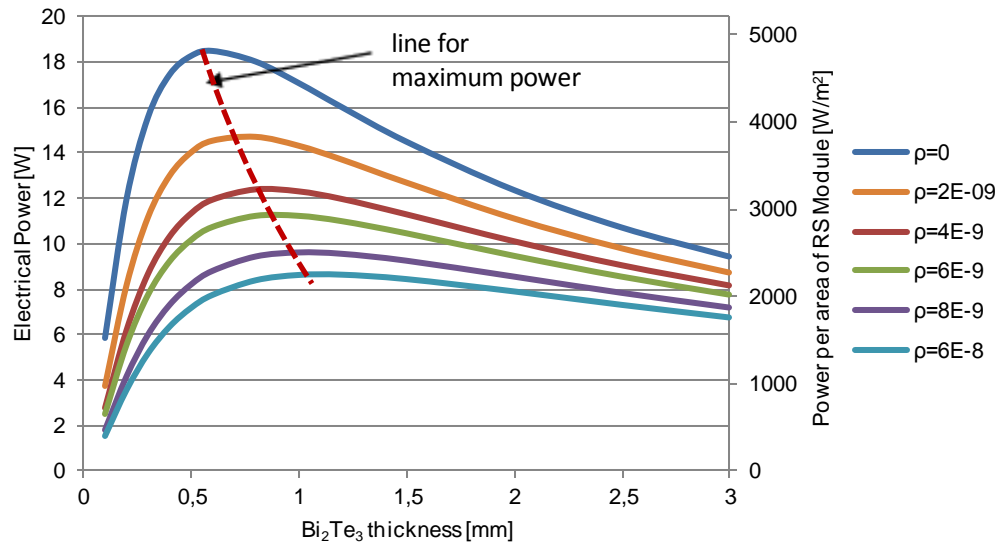


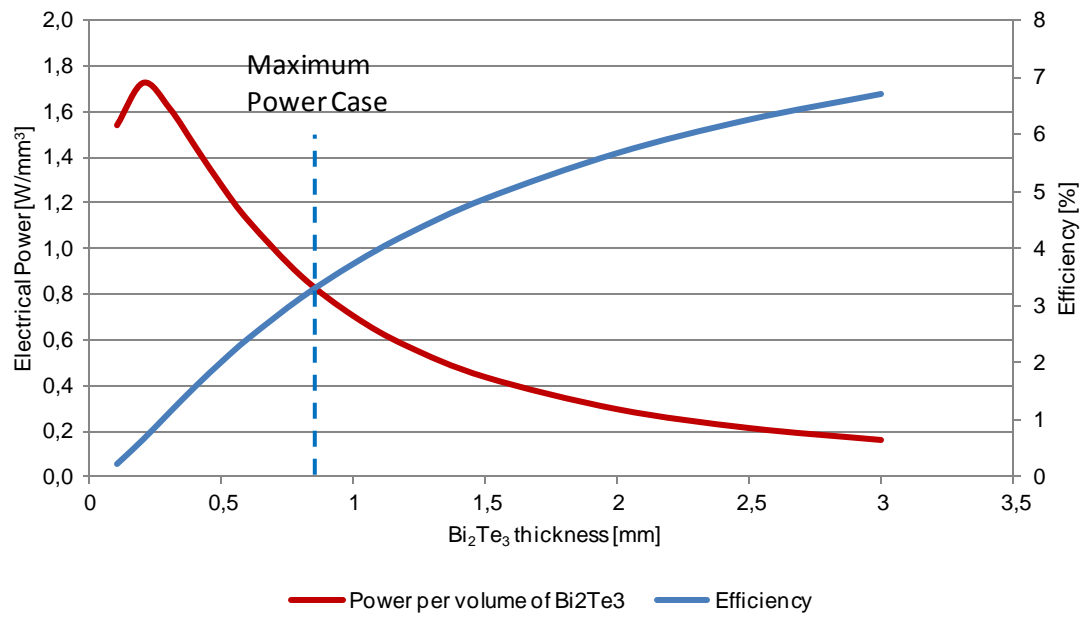
Fig. 9 - Electric power and electrical internal resistance as a function of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  thickness, for three different values of Alumina thicknesses and thermal contact resistances ( $R_S$  module,  $\Delta T=200^{\circ}\text{C}$ )



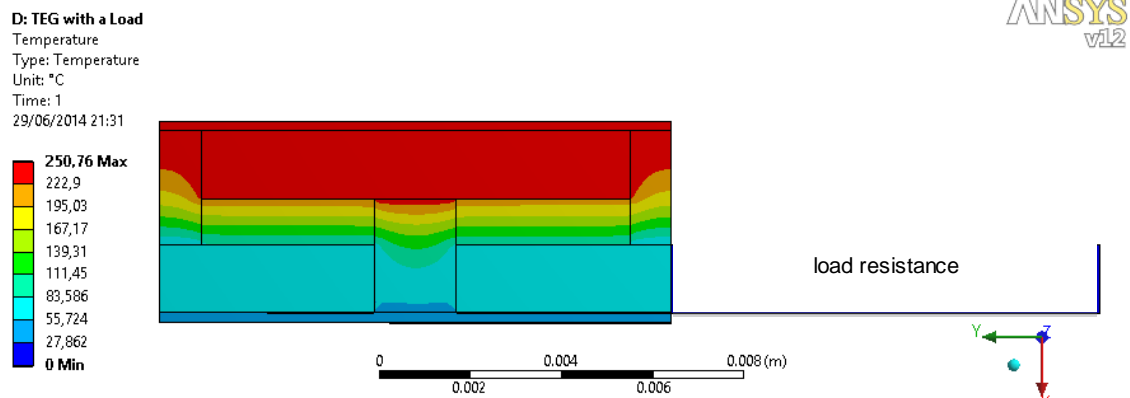
**Fig. 10** - Influence  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  thickness on electrical power for different contact heat transfer coefficients ( $h_c$ , in  $\text{W}/\text{m}^2\cdot\text{K}$ ), for alumina thickness of 0.5mm and electric contact resistivity of  $6 \times 10^{-9} \Omega\cdot\text{m}^2$  (RS module,  $\Delta T=200^\circ\text{C}$ )



**Fig. 11** - Influence of electric contact resistance on electrical power for different electric contact resistivity (in  $\Omega\cdot\text{m}^2$ ), for alumina thickness of 0.5mm and heat transfer coefficient  $h=19000 \text{ W}/\text{m}^2\cdot\text{K}$  (RS module,  $\Delta T=200^\circ\text{C}$ )



**Fig. 12 -** Power per unit volume of Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> and Efficiency as a function of the thickness of Bismuth telluride, (RS module,  $\Delta T=200^{\circ}\text{C}$ )



**Fig.13 -** Temperature Profile along a TEG junction

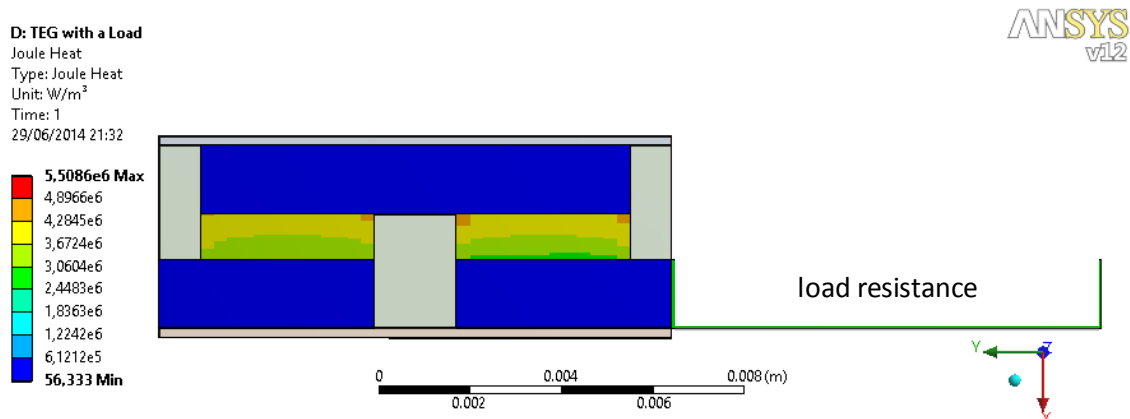


Fig.14 - Joule effect in a TEG junction

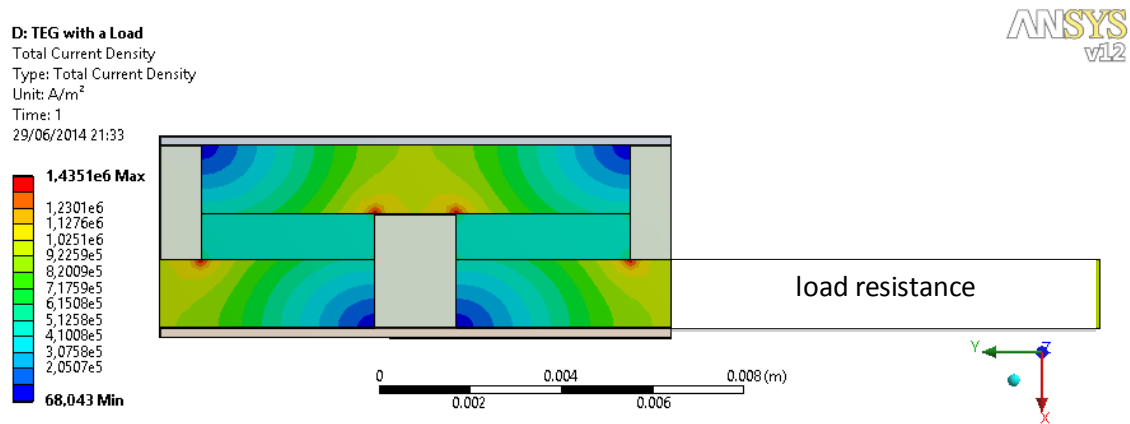


Fig. 15 - Current density in a TEG junction

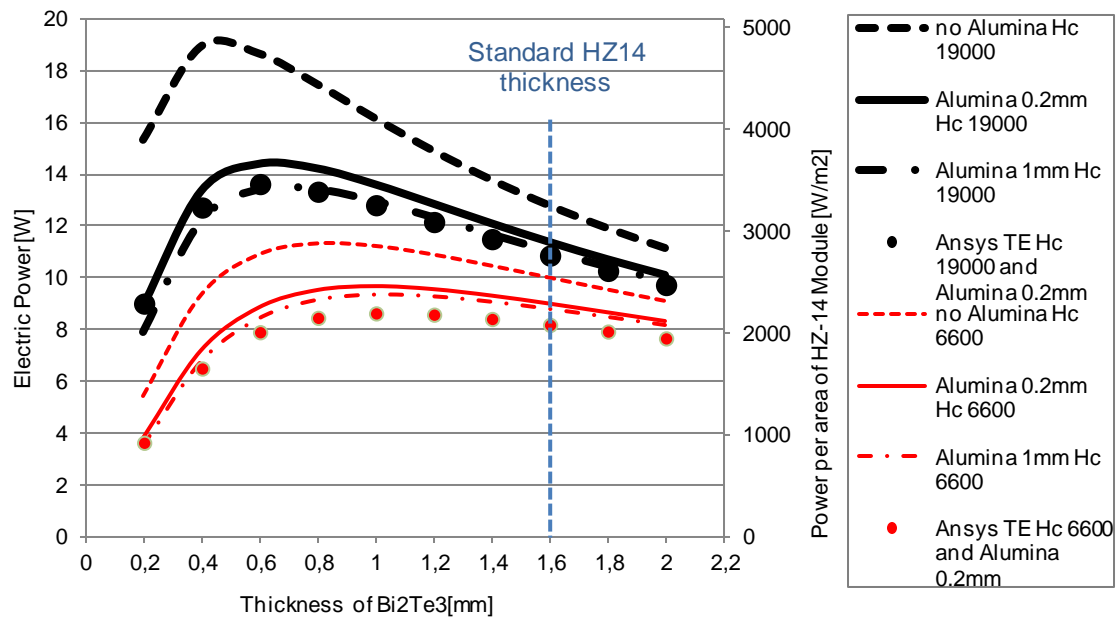
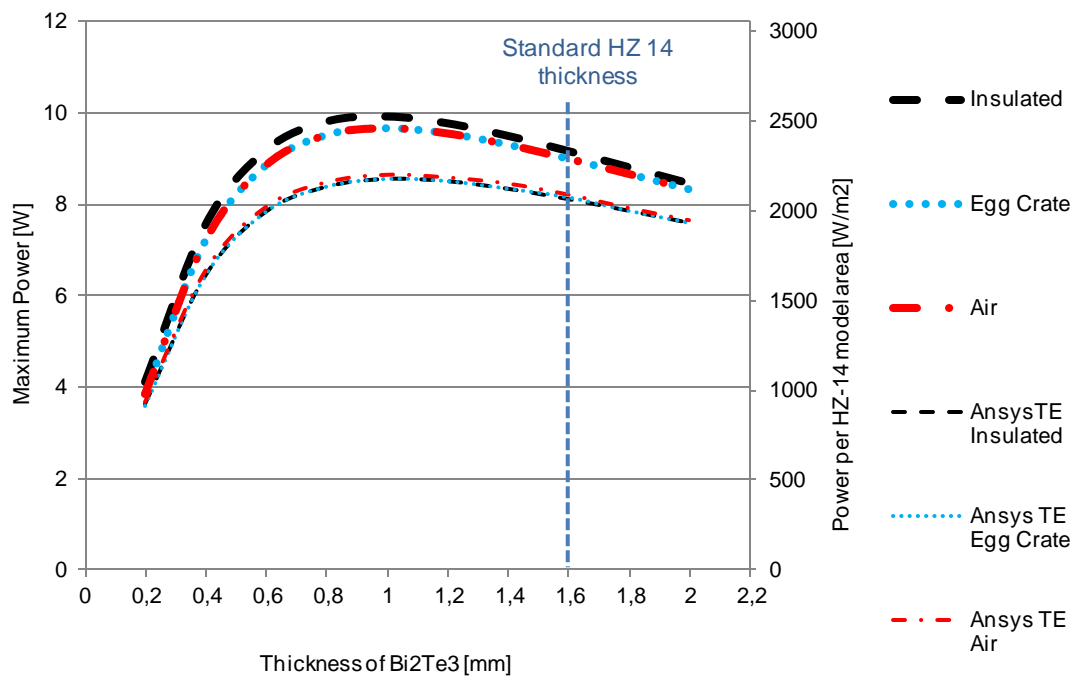
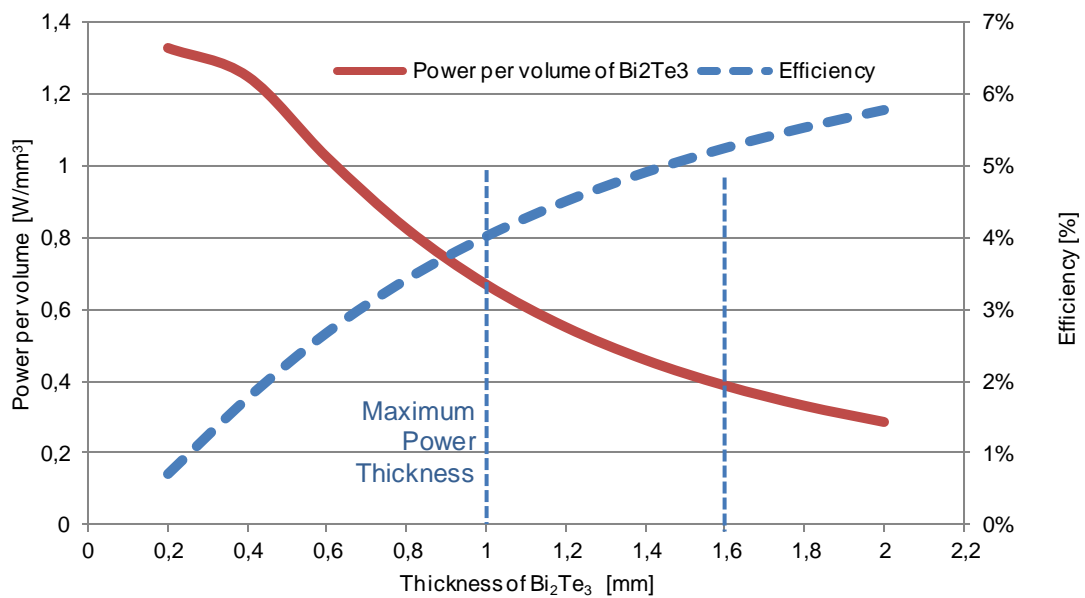


Fig. 16 - Maximum electric power as a function of Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> thickness for different alumina thicknesses  
thick lines: thermal contact conductance = 19 000 W/m<sup>2</sup>K;  
thin lines: thermal contact conductance = 6 600 W/m<sup>2</sup>K;  
dots: ANSYS thermal-electric simulation





**Fig. 17** - Maximum electric power as a function of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  thickness for different Insulations types  
Top thick lines: 1D heat transfer solved with equivalent electric circuit  
Bottom thinner lines: ANSYS Thermal-Electric



**Fig. 18** - Electric Power per volume of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  and efficiency in function of  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  thickness (1D heat transfer solved with equivalent electric)

## APÊNDICE – ARTIGO SUBMETIDO PELO GRUPO DE TRABALHO COM REFERÊNCIA ESPECIAL AO *MATLAB*

Thermoelectric Exhaust Heat Recovery with Heat Pipe-based Thermal Control

Francisco P Brito<sup>1\*</sup>

Jorge Martins<sup>1</sup>

Esra Hançer<sup>2</sup>

Nuno Antunes<sup>1</sup>

LM Gonçalves<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidade do Minho - Guimarães, Portugal

<sup>2</sup> Erciyes University - Kayseri, Turkey

\*francisco@dem.uminho.pt

### **Abstract**

Heat Pipe (HP) based heat exchangers can be used for very low resistance heat transfer between a hot and a cold source. Their operating temperature depends solely on the boiling point of their working fluid so it is possible to control the heat transfer temperature if the pressure of the HP can be adjusted. This is the case of the Variable Conductance Heat Pipes (VCHPs). This solution makes HPs ideal for the passive control of TEG (Thermoelectric Generator) temperature levels.

The Present work assesses both theoretically and experimentally the merit of the aforementioned approach. A thermal and electrical model of a Thermoelectric Generator with VCHP assist is proposed. Experimental results obtained with a Proof of Concept Prototype attached to a small single-cylinder engine are presented and used to validate the model.

It was found that indeed the HP heat exchanger enables the TEG to operate at a constant, optimal temperature in a passive and safe way and with a minimal overall thermal resistance. Furthermore, the use of VCHPs was found to prevent thermal dilution under low loads by effectively reducing the active module area without deprecating the temperature level of the active modules.

## Nomenclature

### Abbreviations

EREV	Range Extended Electric Vehicles
HEV	Hybrid
ORC	Organic Rankine Cydes
TE	Thermoelectric
TEG	Thermoelectric Generator
VCHP	Variable Conductance Heat Pipe

### Variables

$c_p$	Specific heat at constant pressure ( $\text{J.kg}^{-1}\text{K}^{-1}$ )
$g$	Acceleration of gravity ( $\text{m.s}^{-2}$ )
$h_c$	Heat transfer coefficient $\text{W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$
$H_L$	Enthalpy of vaporisation ( $\text{J.kg}^{-1}$ )
$I$	Electric current (A)
$k$	Thermal conductance ( $\text{W.K}^{-1}$ )
$k_l$	Thermal conductivity of liquid ( $\text{W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$ )
$L_c$	Active length of the condenser (m)
$\dot{m}$	Mass flow rate ( $\text{kg.s}^{-1}$ )
$N_{\text{pairs}}$	Number of (P-N) pairs in a thermoelectric module

$n_{\text{teg}}$	Number of thermoelectric modules
$P_{\text{max}}$	Electrical output power at matched load (W)
$\dot{Q}$	Thermal power (W)
$R$	Thermal resistance ( $\text{K.W}^{-1}$ )
$Ri_{\text{total}_{\text{systeme}}}$	Total electrical resistance of the module ( $\Omega$ )
$S$	Shape factor
$T$	Temperature (K)
$T_s$	Saturation temperature of the working fluid
$T_{\text{cond}_w}$	Temperature of the condenser wall
$V_o$	Open circuit voltage (V)
$\alpha$	Seebeck coefficient ( $\text{V.K}^{-1}$ )
$\eta$	Efficiency
$\mu_l$	Dynamic viscosity of the liquid (Pa.s)
$\rho$	Electrical resistivity ( $\Omega\text{m}$ )
$\rho_c$	Contact resistivity ( $\Omega.\text{m}^2$ )
$\rho_l$	Density of the liquid ( $\text{kg.m}^{-3}$ )

#### Subscripts

BiTe	thermoelectric material / legs
cold	Hot side of the thermoelectric generator
coolant	Liquid for cooling in the cold face of TEG
downstream	resistances located downstream of the module
evap	Evaporator (sector 1)
exh_in	Exhaust gases input
exh_out	Exhaust gases output
hot	Hot side of the thermoelectric generator
HP	Heat Pipe
$l$	liquid
Peltier	By Peltier effect
Sector1	Evaporator region
Sector2	Condenser region
TEG	Thermoelectric generator module

## Introduction

### Motivation

The automotive industry is facing ever more stringent goals in terms of Energy efficiency and emissions (both of pollutants and greenhouse gases) [1]. A substantial improvement of the overall vehicle efficiency can be attained by increasing the Internal Combustion Engine (ICE) efficiency. This may be done through strategies such as overexpansion, as explored by the group [2]-[4], but additional measures are required. Vehicle hybridization is one of them, as it enables the deployment of strategies such as regenerative braking energy, efficient urban electric-assisted driving and allows the use, to a higher degree, of the more efficient electric-driven components [5][6].

However, the most abundant source of waste ICE energy is the energy contained in exhaust gases, which is of the same order of magnitude as the mechanical energy provided to the driveshaft [7][8]. Also, on a second law of thermodynamics standpoint, it displays a good recovery potential due to its relatively high temperature. The gradual Increase of vehicle electrification levels as the one encountered in current Hybrids (HEVs) or Range Extended Electric Vehicles (EREVs) makes the conversion of some of the exhaust waste heat into electricity an attractive solution [5]. While the group has been exploring the concept of an efficiency-oriented range extender based on overexpansion [9], the addition of exhaust recovered electric energy would make all the sense for such applications. Moreover, I.C. engines working as generators have well defined operating conditions, allowing for the optimization of the waste exhaust heat recovery system. Even conventional vehicles would gain with the harvesting of this energy by reducing the load of the alternator or even being able to eliminate its need altogether [10][11].

#### *Thermoelectric Generators*

One of the ways for harvesting exhaust Energy is by using Thermoelectric (TE) modules based on the Seebeck effect. Although they still display efficiencies lower than thermodynamic cycle based systems (e.g. Organic Rankine Cycles, ORC) [12], newly developed materials displaying

better efficiencies are steadily appearing. This is the case for TE using nanostructured materials [13]. Unlike bulky ORC systems, Thermoelectric Generators (TEGs) are intrinsically scalable and therefore suitable for low power ranges still not achieved by ORCs [14]. Furthermore they are reliable as they possess no moving parts.

Some of the major challenges for the adoption of Thermoelectric Generators in automotive applications are related to their still low power density and high cost, as well as their thermal management [15].

There is ongoing research in materials which simultaneously display high TE conversion figure of merit [16] and do not use bulk rare earth materials. In this respect, some promising technologies for automotive applications include the use of Magnesium Silicides, Zinc Anthimonide, Skutterudite and Half Heusler based materials [10][17]. Real world exhaust heat recovery applications are being explored by several companies with these promising materials, but enhancements on their chemical (e.g. oxidation) and/or physical (e.g. sublimation) stability are still being overcome. In the meantime, the optimization of current commercially available module materials, such as those based on Bismuth Telluride seems to be a more readily available solution. This could be done by finding ways of reducing the thickness of modules without damaging their output as explored by the authors [18]. For this to happen, very low overall heat paths leading to the active TE junctions must exist [19]. Therefore, TEGs still need improvements in terms of thermal management. On one hand, modules are temperature limited, but on the other hand their output increases as temperature increases. It is therefore desirable that the temperature the modules will encounter be always as high as they are able to safely withstand. Therefore, not only there is the need for a low overall heat exchanger resistance, but also a suitable control of the operating temperature should be present. So there is clearly the need for a system with the aforementioned characteristics and possessing the capability of operating efficiently under variable thermal load.

Currently the protection against module overheating during excess thermal load events involves the bypass of exhaust gases, which means wasting the most valuable driving cycle events in terms of exhaust energy. Another alternative would be to convert the temperature of the heat reaching the TEGs to the optimal level, irrespective of engine load [20][21].

### *Heat Pipes*

The scope of the group's work is to overcome the aforementioned thermal management shortcomings using heat pipe (HP) heat exchangers, and specifically Variable Conductance Heat Pipes (VCHPs) [22]. HPs (see Figure 1) are very simple heat transfer elements displaying a very high heat transfer rate due to their principle of operation based on phase change. They basically consist of a pipe containing a phase change fluid which boils as it absorbs heat from the heat source (in the present case, the exhaust gases). Vapour then rises and releases the heat through condensation to the heat sink (in the present case, the TE modules). The condensed fluid then falls back to the HP evaporator through gravity or through its surface tension (e.g. wettability) as in the case of HP with an inner wick (not used in the present case) [22].

Some specific advantages of using HP based heat exchangers with TEGs rely on the fact that they are not in direct contact with the exhaust circuit. Therefore, their location is more flexible and, in the case of the VCHP, there is no need for waste gate / bypass valves, since excess exhaust temperature is passively downgraded. This occurs because the operating temperature is the fluid boiling temperature, which solely depends on its pressure. This pressure can be made fairly constant with the addition of a small expansion tank (see Figure 2). This tank enables a near constant pressure irrespective of load, because there is enough volume for the steam accommodation without incurring in significant pressure rise. The VCHP pressure may be pre-regulated in order to obtain the desired fluid boiling temperature. The variation of thermal load from the exhaust will be translated into a variable active length of the condenser (the

length reached by the vapour) rather than into a variable operating temperature (the case of standard HPs). This results in no thermal dilution of the system, as only the necessary amount of modules will be active, working at the optimized temperature (e.g. a kind of cascading operation).

### *Proposed Approach*

The present approach has been originally proposed by the authors in some previous publications. Several simplified proof of concept prototypes were tested using a propane blowtorch heat source [21][23], along with some simplified system modelling [24]. The influence of HP temperature on TEG output was assessed for a limited number of HP temperatures and with the generator attached to a small 10HP Diesel engine, demonstrating the scalability of the system [20]. It was found that there is an optimal HP temperature which maximizes output and expressions were derived to estimate the maximum output for given conditions and a given global heat exchanger efficiency. The present work carries out a detailed modelling of the condenser part of a VCHP and of the thermoelectric modules, and also presents some experimental results performed for a broad set of conditions. Although the approach is 1D, it incorporates procedures which compensate for 3D effects and takes into account all heat sources and sinks due to diffuse Joule effect, contact resistance Joule effect and localized Peltier heat sources and sinks.

## **Model**

### *Generator modelling*

Figure 1 shows an outline of the HP system. Since HP temperature,  $T_{HP}$ , is constant, the evaporator (sector 1) and the condenser (sector 2) thermal powers ( $\dot{Q}_{sector\ 1}$  and  $\dot{Q}_{sector\ 2}$ ) may be calculated independently:



$$\dot{Q}_{sector\ 1} = \frac{\bar{T}_{exh\_in} - T_{HP}}{R_{sector\ 1}} ; \quad \dot{Q}_{sector\ 2} = \frac{T_{HP} - \bar{T}_{coolant}}{R_{sector\ 2}} \quad (26)$$

Where  $T_{exh\_in}$  is the inlet exhaust gases temperature,  $T_{coolant}$  the temperature of the coolant fluid of the TEG and  $R_{sector\ 1}$  and  $R_{sector\ 2}$  are the total thermal resistances of the evaporator and condenser regions. The actual thermal power crossing the generator will be the lowest one of the two. This is so because the condenser will not be able to absorb excess boiling power, while some of the condenser power capacity will be wasted if not sufficient evaporator power is present. So, the effective power curve of the apparatus will be the lower envelope of the evaporator and condenser power curves:

$$\dot{Q}_{total} = \min(\dot{Q}_{sector\ 1}; \dot{Q}_{sector\ 2}) \quad (27)$$

This allows to define the load of the condenser,  $Load_{cond}$ , as follows:

$$Load_{cond} = \frac{\dot{Q}_{total}}{\dot{Q}_{sector\ 2}} \quad (28)$$

This will be the fraction of the generator length which will be active, as depicted in Figure 2.

Therefore, all output variables (e.g. thermal power, voltage, electric power) will correspond to a fraction  $Load_{cond}$  of the full load values. If, for a given set of conditions, the load is always 100%, it means that the generator's condenser is undersized for the application and that more modules and a bigger condenser could be used to harvest more exhaust power. If the condenser load is much lower than 100%, it means that the amount of modules used and the size of the condenser are excessive for the application or at least that the exhaust power absorbed by the heat pipes is too low. This implies that only a fraction of the total number of TEGs will be active.

#### *Sector 1 (Exhaust – HP interior)*

Exhaust heat can only be absorbed as long as its temperature ( $T_{exh\_in}$ ) is higher than  $T_{HP}$  (see figure 1). Therefore, the higher is  $T_{HP}$  the lower will be the available (absorbable) exhaust thermal power ( $\dot{Q}_{available}$ ) for a given mass flow of gases ( $\dot{m}_{exh}$ ) at a given inlet temperature ( $T_{exh\_in}$ ):

$$\dot{Q}_{available} = \dot{m}_{exh} \cdot c_{p\_exh} \cdot (T_{exh\_in} - T_{HP}) \quad (29)$$

With  $C_{p\_exh\_in}$  being the specific heat of the inlet gases.

The efficiency of the evaporator is therefore defined as follows:

$$\eta_{evap} = \frac{\dot{Q}_{sector1}}{\dot{Q}_{available}} \quad (30)$$

Some heat transfer modelling has been performed to estimate the global thermal resistance of Sector 1. The convection at the finned heat exchanger was modelled with the Zukauskas [25] expression for a flow over a staggered tube bank and the finned surface efficiency was also estimated [26]. Then, the Rohsenow expression for nucleate boiling was used [22].

Unfortunately, results were not satisfactory. Surprisingly, though, when considering a constant evaporator efficiency (based on available power) of 40%, a quite good correlation with the experimental results was obtained. This low value might be related to the highly oxidized and fouled status of the heat exchanger. Therefore, the evaporator modelling at this stage consisted solely on imposing a constant heat exchanger efficiency based on the available power:

$$\dot{Q}_{sector1} = \eta_{evap} \cdot \dot{Q}_{available} \quad (31)$$

*Sector 2 (HP interior – TEGs – Cooling ducts)*

The Nusselt theory for film condensation over a condenser of active length  $L_c$  was implemented [22] to calculate the average heat transfer coefficient,  $h_{cond}$ :

$$h_{cond} = 0.943 \left[ \frac{H_L \rho_l^2 g k_l^3}{L_c \mu_l (T_s - T_{cond\_w})} \right]^{0.25} \quad (32)$$

Where  $H_L$  is the enthalpy of vaporization of the liquid,  $\rho_l$  is the density of the liquid,  $g$  is the acceleration of gravity,  $k_l$  is the thermal conductivity of the liquid,  $\mu_l$  is the dynamic viscosity of the liquid,  $T_s$  is the saturation temperature of the fluid (considered to be  $T_{HP}$ ) and  $T_{cond\_w}$  is the temperature of the condenser wall.

Concerning the estimation of the thermal resistances corresponding to the heat transfer by conduction through solids, the 1D approach poses a difficulty, since there is a 3D heat path. Fortunately, it is possible to use the conduction shape factor concept ( $S$ ), which allows calculating the 1D thermal resistance equivalent of a 3D shape in situations where a non-uniform section area and thickness exist. In practical terms,  $S$  stands out as an equivalent “section area to thickness ratio” in the conduction thermal resistance expression [26]:

$$R_{Cond} = \frac{1}{Sk} \quad ; \quad S = (A/t)_{eq} \quad (33)$$

Expressions to calculate shape factors are available for a limited range of reference geometries. The solution used to derive the shape factor for the condenser blocks, cooling ducts and some TEG sections was to simulate those geometries in a solver (e.g. ANSYS CFX) for a given  $\Delta T$  across their thermal inlet and outlet faces, then extract the thermal power and finally deduce  $S$  from the following formula:

$$\dot{Q} = \frac{\Delta T}{R} = Sk\Delta T \quad (34)$$

The value calculated for  $S$  will be universal, that is, independent of  $\Delta T$  because it is a geometric parameter.

The thermal contact resistances are calculated from the contact heat transfer coefficient,  $h_c$ , and the corresponding section area,  $A$ :

$$R_c = \frac{1}{h_c A} \quad (35)$$

Some values for the contact heat transfer coefficients for specific pairs of contact, for various contact pressures and for various interstitial media (e.g. vacuum, air, thermal grease) are available in the literature [27][28][29][30]. Thermal grease was used at the module interfaces with the condenser walls (hot face) and the cooling plate walls (cold face), so a value  $h_c=19\text{kW/m}^2\text{K}$  (silicone oil thermal grease [27]) has been considered. Unfortunately, no information has been found in literature regarding typical thermoelectric generator internal interfaces (e.g. aluminium oxide/copper conductor/ $\text{BiTe}_3$  interfaces). These values are likely to vary significantly depending on the manufacturer and the materials and manufacturing processes used. One source displays values for bonded surfaces used in power electronics (Silicon chip/aluminium with 0.02-mm epoxy [28]). These display average contact heat transfer coefficients close to the ones used for interfaces with thermal grease. Therefore, and although this issue still deserves further investigation in the future, the present work has opted to use a uniform value for all the interfaces ( $h_c=19\text{kW/m}^2\text{K}$ ).

#### *Sector 2 - Detailed TEG modelling:*

Concerning the modelling of TE modules, analytical 1D expressions for the estimation of thermal power and temperature have been derived. One challenge of the conventional 1D heat transfer models is the existence of diffuse heat sources due to Joule effect within the

materials with current flow. These diffuse heat sources cannot be correctly simulated using the conventional equivalent electric circuit analogy. However, there is an analytical solution for the temperature field within a medium with a diffuse Joule heat source,  $\dot{q}$  [26]:

$$T(x) = -\frac{\dot{q}}{2k}x^2 + C_1x + C_2 ; \quad \dot{q} = -\frac{\dot{Q}_{jouletotal}}{A_{BiTe} \cdot l_{BiTe} \cdot n_{legs} n_{TEG}} \quad (36)$$

Where  $\dot{Q}_{jouletotal}$  is the total Joule thermal power generated within the legs of all modules,  $A_{BiTe}$  is the section area of a TEG leg,  $l_{BiTe}$  is the thickness of the TEG legs,  $n_{legs}$  is the number of legs in one module,  $n_{TEG}$  is the total number of modules and  $C_1$  and  $C_2$  are the constants of the equation, to be determined. In the case of a TE element leg such as the one outlined in

Figure 3, the following conditions apply:

$$\begin{cases} T(0) = T_{TEGhot} \rightarrow C_2 = T_{TEGhot} \\ -k_{BiTe} A_{BiTe} n_{legs} n_{TEG} \frac{dT(0)}{dx} = \dot{Q}_1 \rightarrow C_1 = -\frac{\dot{Q}_1}{k_{BiTe} A_{BiTe} n_{legs} n_{TEG}} \end{cases} \quad (37)$$

With  $\dot{Q}_1$  being the total thermal power (all modules) leaving the hot face of the TE material (as defined in Figure 3),  $T_{TEGhot}$  the temperature at the hot face of the TE element and  $k_{BiTe}$  the average thermal conductivity of the TE legs. The temperature distribution along the TE element may be calculated anywhere along the TE material thickness applying these conditions to (36). Of special interest is the temperature difference across the active TE leg junctions because it is the one responsible for the Seebeck voltage:

$$T_{TEGhot} - T_{TEGcool} = \left( \dot{Q}_1 + \frac{\dot{Q}_{jouletotal}}{2} \right) \frac{l_{BiTe}}{k_{BiTe} A_{BiTe\_total}} \quad (39)$$

Where  $T_{TEGcool}$  is the temperature of the cold face of the TE element, and  $A_{BiTe\_total}$  is the total area of the legs. Some of the module's layers will display strong 3D heat flux, something which is not suitably treated with a 1D approach. For instance, the heat entering the whole

module through the alumina will be channelled through the metal conductors interface only, that is, the heat inlet area will be higher than the outlet area. The same 3D heat flux will exist across the metal conductors: the heat reaching the metal conductors coming from the alumina substrate will be channelled into the TE element leg interface, which is smaller. However, it is possible to deduce conductive shape factors according to eqs. (33) and (34) to compensate for these 3D effects, keeping a 1D heat transfer approach. The shape factors for alumina and metal conductors were calculated with a commercial solver (ANSYS CFX) and using eq. (34). Since  $S$  is a geometric parameter, it will not depend on thermal inputs, only on the corresponding geometry.

Once the circuit is closed with a resistive load, the Seebeck voltage will induce a current. The Joule effect will be present within the TE elements ( $\dot{Q}_{Joule\_BiTe}$ ) and the copper conductors ( $\dot{Q}_{Joule\_copper}$ ). Localized heat sinks and sources due to the Peltier effect ( $\dot{Q}_{peltier}$ ) will appear at the hot and cold junctions of the TE materials [31]. Also localized heat sources due to electric contact resistance Joule effect ( $\dot{Q}_{joule\_contact}$ ) will appear at those junctions (see Figure 3):

$$\dot{Q}_{peltier_{hot}} = -\alpha_{BiTe_{pair}} * T_{TEG_{hot}} * I * N_{pairs} * n_{TEG} \quad (40)$$

$$\dot{Q}_{peltier_{cold}} = \alpha_{BiTe_{pair}} * T_{TEG_{cold}} * I * N_{pairs} * n_{TEG} \quad (41)$$

$$\dot{Q}_{joule_{contact}} = \rho_c / A_{BiTe_{total}} * I^2 \quad (42)$$

$$\dot{Q}_{Joule\_BiTe} = \rho * l / A_{BiTe_{total}} * I^2 \quad (43)$$

$\alpha_{BiTe_{pair}}$  is the Seebeck coefficient of the P-N junction ( $\alpha_P - \alpha_N$ ),  $I$  the Seebeck-induced current,  $N_{pairs}$  the number of thermoelectric P-N pairs per module,  $n_{TEG}$  the number of thermoelectric modules,  $\rho_c$  the electrical contact resistivity,  $\rho$  the electrical resistivity of TE element material,  $l$

the TE element length and  $A_{BiTe\_total}$  the total contact area (between TE elements and metal).

Due to these heat sources/sinks, the thermal power will vary slightly along the heat path.

According to the Fourier law of cooling [26], the heat generated will always flow in the opposite direction of the thermal gradient. Therefore, unless these heat sources would be so strong as to create local temperature maximums/minimums (in which case heat flux would occur in both directions), the localized heat generated will flow in one direction only, the opposite direction of the thermal gradient.

In the absence of heat sources/sinks, the thermal power between two generic nodes 1 and 2,  $\dot{Q}_{1:2}$ , will be a function of the corresponding thermal resistance,  $R_{1:2}$ , and of the temperature differential,  $T_1 - T_2$ :

$$\dot{Q}_{1:2} = \frac{T_1 - T_2}{R_{1:2}} \quad (44)$$

It is possible to use this equation along all the nodes of a 1D heat path where only the temperature of the extreme nodes is known, and express the temperature of a node as a function of the adjacent one:

$$\dot{Q}_{23} = \frac{T_2 - T_3}{R_{23}} \Rightarrow T_2 = T_3 + R_{23}\dot{Q}_{23} \quad ; \quad T_3 = T_4 + R_{34}\dot{Q}_{34} \quad ; \quad \dots \quad T_{n-1} = T_n + R_{n-1n}\dot{Q}_{n-1n} \quad (45)$$

The thermal powers crossing each node will not always be constant due to the heat sources and sinks present, which are obtained from eqs (40) thru (43). The current will be a result from the Seebeck effect calculations, but it may be initially assumed as being zero and then corrected after each iteration.

By carrying out a backward substitution of these equations into one another and finally into (44) it is possible to eliminate temperature unknowns and obtain an expression for the thermal power as a function of known parameters, such as the temperatures of the nodes located at the extremities of the heat path. In the present case, the temperatures at the extremities of

the heat path are the heat pipe temperature,  $T_{HP}$ , which is known, and the average coolant temperature,  $\bar{T}_{coolant}$ , which is obtained from  $T_{coolant\_in}$  and from the power transmitted to the coolant,  $\dot{Q}_{coolant}$ :

$$\dot{Q}_{coolant} = \dot{m}_{coolant} C_{p\_coolant} (T_{coolant\_out} - T_{coolant\_in}) \quad (46)$$

Where  $\dot{m}_{coolant}$  and  $C_{p\_coolant}$  are the mass flow rate and specific heat of the coolant. Of course,  $\dot{Q}_{coolant}$  is unknown. Nonetheless, it may be initially assumed as being zero and then corrected iteratively once the thermal power transmitted to the water has been determined in each iteration.

The following expression for the estimation of the total thermal power has been derived (see Figure 3):

$$\dot{Q}_{sector2} = \frac{\left( T_{HP} - \bar{T}_{coolant} - \left( \left( \dot{Q}_1 + \left( \frac{\dot{Q}_{Joule\_BiTe}}{2} \right) \right) * R_{BiTe} \right) - \dot{Q}_2 * (R_2 + R_{downstream}) \right)}{R_1 + R_2 + R_{downstream} + R_{BiTe}} \quad (47)$$

With  $R_{BiTe}$  being the resistance of the TE elements and  $R_{downstream}$  being the thermal resistances upstream of the module.

$$\dot{Q}_1 = -\dot{Q}_{peltier_{hot}} + \dot{Q}_{contact_{hot}} + \dot{Q}_{copper_{hot}} \quad (48)$$

$$\dot{Q}_2 = \dot{Q}_{copper_{tot}} + \dot{Q}_{peltier_{tot}} + \dot{Q}_{contact_{tot}} + \dot{Q}_{Joule\_BiTe}$$

$$R_1 = R_{copper_{hot}} + R_{ceramic_{hot}} + R_{upstream} + R_{contact_{ceramic_{copper}_{hot}}} + R_{contact_{copper_{BiTe}_{hot}}} \quad (49)$$

$$R_2 = R_{copper_{cold}} + R_{ceramic_{cold}} + R_{contact_{ceramic_{copper}_{cold}}} + R_{contact_{copper_{BiTe}_{cold}}}$$

The subscripts *hot* and *cold* correspond to the hot or cold sides of the TEG, the *ceramic* and *copper* subscripts correspond to the alumina substrate and the metal conductors, respectively, while  $R_{upstream}$  and  $R_{downstream}$  include all the thermal resistances located upstream and



downstream of the module, respectively. The main contribution for the downstream parcel will be the convection resistance, which has been considered to be that of a developing flow inside a cooling duct (Sieder and Tate)[26]:

$$Nu = 1.86 \left( \frac{RePrD_h}{L} \right)^{1/3} \left( \frac{\mu_b}{\mu_s} \right)^{0.14} \quad (50)$$

With  $Re$ ,  $Pr$  and  $D_h$  being the Reynolds number, Prandtl number and hydraulic diameter.  $L$  is the characteristic duct length. This characteristic length will not necessarily be the total length of the heat sink duct, which in the present case has a zig-zag profile, but the length which is representative of the phenomenon of flow developing inside a duct. Flow under development (flow within the so-called entry region) has a higher mixing degree than fully developed flow, in which the velocity profile has already stabilized. After flow obstacles or steep duct bends, flow development is re-initiated, therefore, the characteristic length to be used in (50) will be the length of one of the straight portions of the zig-zag heat sink ducts.

Having calculated  $\dot{Q}_{sector2}$  it will then be possible to calculate the temperatures at each interface, starting from one of the known temperatures (e.g.  $T_{HP}$  or  $\bar{T}_{coolant}$ ) and using (45). Of course, this will be an iterative process since, for instance, it will only be possible to estimate Peltier and Joule powers once the Seebeck effect has been calculated, and Seebeck voltage and current calculations require the temperature field to be calculated, and so on. Also the temperature-dependent physical properties need to be updated at the end of each iteration. The expressions for the open circuit voltage ( $V_o$ ) and for the maximum power ( $P_{max}$ ) at matched load (load resistance equalling the internal resistance) are as follows:

$$V_o = n_{TEG} * N_{pairs} * \alpha_{BiTe_{pair}} * (T_{TEG\_hot} - T_{TEG\_cold}) \quad (51)$$

$$P_{max} = \frac{V_o^2}{4R_{i_{total_{systeme}}}} \quad (52)$$

$\alpha_{BiTe_{pair}}$  is the Seebeck coefficient of the P-N thermoelectric junction ( $\alpha_p - \alpha_n$ ), and  $R_i$  is the total electric resistance (copper, contacts and thermoelectric element) of the system, sometimes called internal resistance of the system. The  $TEG\_hot$  and  $TEG\_cold$  subscripts correspond to the TE/copper junction temperatures at the hot side and the cold side, respectively.

#### *Experimental Apparatus (proof of concept)*

To enable the assessment of the merit of Variable Conductance Heat Pipe (VCHP) Heat Exchangers for the exhaust heat recovery from an Internal Combustion (IC) engine, a proof of concept was developed and built. This proof of concept prototype has already been described in detail in [20].

As previously explained, the TEG modules used in the present work cannot withstand temperatures above 250°C, but the exhaust of IC engines might exceed 900°C, so the concept of temperature control by using pressure controlled Heat Pipes (HP) as a heat transfer media was used. The temperature at which the heat transfer would occur was controlled by the manipulation of the HP pressure.

The present work uses the exhaust gases of a small Diesel engine (Figure 4) as the heat source, allowing a proof-of-concept testing and an illustration of the concept scalability. The heating power of the exhaust gases was within the range of the power that could be handled by the apparatus, but unfortunately the somewhat poor condition of the finned heat exchanger did not allow the exploration of the full potential of the thermal device.

The experimental apparatus is comprised of the following elements:

- Small internal combustion engine (Figure 4) Yanmar L100N Diesel DI, with a shaft maximum power of 10 hp @ 3600rpm and with a maximum exhaust flow rate of 0.02 kg/s @ ~350°C;
- Heat transfer device consisting of various heat pipes with the evaporator section being in contact with the hot exhaust gases (with fins) and the condenser section consisting of drilled flat copper blocks (Figure 5 and 7);
- 12 TEG modules (ETDYN GM-250-49-45-25) attached to the three flat copper blocks of the HP (see Figure 6);
- Water cooled heat sinks, attached to the cold face of the TEG modules, made from solid copper blocks with drilled channels, forming an internal zig-zag shape with a flow rate around 0.03 kg/s (Figure 6).

The hot exhaust gases coming from the IC engine transfer their enthalpy to the finned copper tubes (Figure 7), boiling the water contained within them (see Figure 1). The generated steam travels upwards within the copper tubes and into the drilled holes of the condenser copper blocks, where it condenses. The heat from the phase change of the water travels across the TEG modules and is released to a flow of water that runs inside the heat sinks attached to the cold side of the TEG modules. Therefore the heat path can be divided into the following sections (Figure 5):

- a) exhaust gases from the IC engine to finned evaporator ;
- b) from the fins and copper tube walls (8mm outer diameter) to the boiling water as latent heat;
- c) heat transport, through the vapour motion, from the evaporator to the condenser region;
- d) from the condensing water to the wall of the copper blocks;
- e) from the copper blocks through the TEG modules to the heat sink material;
- f) finally the heat is withdrawn from the walls by the coolant flow.

The referred Sector 1 includes a) to c), whereas Sector 2 comprises c) to f). Several HP temperatures between 103 and 188°C were tested, using water as phase change fluid.

Regarding temperature measurements, type K thermocouples were attached to a high resolution 24 bit National Instruments data acquisition system NI 4350 with  $\pm 0.42\text{K}$  thermocouple measurement accuracy. This accuracy affects the estimation of the thermal power, which is computed based on the temperature rise of the coolant flow. Thus, for the typical coolant flow rate used (80 L/h) a maximum error of  $\pm 37\text{W}$  would be obtained in the thermal power estimation. The accuracy of the flow rate measurements will also affect the accuracy of the thermal power estimation. Although the flow rate was found to have little fluctuation over time ( $< \pm 1\%$ ), it was recorded several times and averaged. This was done by measuring the time necessary to fill a 1L graduated cup. A measurement accuracy of  $\pm 1\text{cL}$  (corresponding to  $\pm 1\%$  measurement accuracy) plus the effect of the flow rate fluctuation will roughly correspond to  $\pm 2\%$  global accuracy of the flow rate estimation.

System voltages (both open and closed circuit) were measured by several National Instruments NI USB 6008 cards with 12 bit resolution and  $\pm 14.7\text{ mV}$  accuracy at room temperature. This represents a relative accuracy between  $\pm 0.7\%$  and  $\pm 1.1\%$  over the range of variation of the average open circuit voltage per module, under steady state conditions. Since the matched power output is a function of  $V_o^2$ , the effect of the latter parameter on the accuracy of the electric power will be between  $\pm 1.4\%$  and  $\pm 2.2\%$ . The load resistances used were Caddock MP930 Series TO-220 Radial Power Film Resistor with  $0.5\Omega \pm 1\%$  each. Since the electric power is inversely proportional to the load, the variability of the load resistance will affect  $\pm 1\%$  the estimation of the electric power. Therefore, the estimated value of the matched electric power will display a combined accuracy between 2.4% and 3.2% as a consequence of the accuracies of the open circuit voltage and the load resistance. The calculated accuracies seem to be sufficient for the purpose of the present work.

## Results and Discussion

Figure 8 shows the evolution of the inlet and outlet exhaust temperatures, the HP temperature and the average coolant temperature (water) along time for a sample HP pressure/temperature of 7.8bar/168°C. On one hand, it may be seen that the HP temperature stabilizes quickly at 168°C, which is the boiling temperature corresponding to the pre-regulated pressure (7.8 bar). On the other hand, it may be seen that the heat exchanger efficiency is not high, since there is still a lot of available  $\Delta T$  between the outlet exhaust temperature and the HP temperature (the temperature the gases would achieve  $T_{HP}$  for 100% heat exchanger efficiency).

Some more temperature plots of the same test are presented in Figure 9. The hot and cold face temperatures of the TEGs are shown against the HP temperature. Low thermal resistances at the hot side of the TEG may be observed. For instance, the hot face temperature of Condenser Block 3 (the condenser block located lowest along the HP, as seen in Figure 9b) is nearly equal to the HP temperature. So this block is working at full load (the vapour fully reaches it). While there is no temperature data for the intermediate Condenser Block 2, the temperature data for Condenser Block 1 (the highest located one) indicates that the vapour is reaching it only partially, so the generator is working at part load. This means that the evaporator is not producing enough vapour for the capacity of the condenser. The main reason for this to happen is that there is not a lot of available exhaust power (the engine is rather small). Moreover, the efficiency of the heat exchanger is low (only around 40% of the available exhaust heat is being absorbed). It is likely that this low efficiency is mainly attributed to the convection-related thermal resistance rather than the heat pipe boiling resistance, which is, typically, very low.

Figure 10 displays the thermal power that reaches the cooling water coming from each of the three condenser block. It has been computed by accounting for the temperature rise

experienced by the coolant according to (46). The cascading operation of the system may be observed as the vapour reaches higher and higher up the various condenser blocks over time. Again, it may be observed that the upper condenser block never gets to operate at full load because there is not enough vapour production (condenser capacity is higher than evaporator power).

The electric power of each block is represented in Figure 11. This is the matched-load electric power of the generator. These values were obtained by measuring the open circuit voltage for half of the modules and measuring the closed circuit voltage for another half of the modules using a load with a resistance similar to the internal resistance of the modules. These two values allowed to calculate the internal resistance of the modules and to estimate the maximum output of the modules through (52). The same cascading operation may be observed in power output, as each block starts operating once the previous one has reached its full load.

The first comparisons between predictions and experiments may be observed in Figure 12. It represents the temperature profile (calculated and experimental) along the various material layers of Sector 2 (HP – TEG – Cooling system) for an HP pressure / temperature of 1.1 bar / 103 °C. The comparison can only be made at four different locations where temperatures have been recorded. In these locations the differences between theory and experiment are small. The white areas represent the several interfaces with their corresponding temperature fall due to thermal contact resistance. This Figure is helpful to understand where the total available  $\Delta T$  ( $T_{hp} - \bar{T}_{coolant}$ ) is being deprecated down to the useful  $\Delta T$ , the one occurring between the hot and cold junctions of the active TE materials ( $T_{TEG_{hot}} - T_{TEG_{cool}}$ ), represented by the BiTe area in Figure 12. It may be seen that the thermal resistance of the HP is very small, smaller than the thermal contact resistances of the interfaces. The importance of these phenomena for the output of TEGs is being investigated by the authors in a different article submission.

These phenomena are especially relevant if the objective is to minimize TEG thickness to cut material costs.

Figures 13 thru 15 display the global, steady state predictions and experimental measurements for Thermal Power (Figure 13), Open Circuit Voltage (Figure 14) and Matched Electric Power (Figure 15) for the whole HP pressure / temperature range tested (100 °C to 190 °C).

The results for the thermal power reaching the coolant system may be observed in Figure 13.

Concerning the experimental results for each block, it may be observed that for low HP temperatures the power is low but all the blocks are fully operating, with similar thermal output. Thermal power increases as HP temperature increases, up to 160 °C. As HP temperature increases it may be observed that the power starts to drop at the upper condenser block (Block1), then in the middle block (Block 2). As a consequence, the total thermal power output,  $\dot{Q}_{coolant}$  decreases for HP temperatures above 160 °C. The reason for this trend may be better understood by looking at the simulation results, which distinguish between evaporator power ( $\dot{Q}_{sector1}$ ), and maximum condenser power (or condenser power capacity,  $\dot{Q}_{sector2}$ ). According to eq. (27), the effective thermal power crossing the generator will be the lower envelope of both these predicted curves, presented in Figure 13 both for sector 1 (evaporator) and sector 2 (condenser). At low HP temperatures, and according to eq. (31), the evaporator power is high because the available power, calculated through eq. (29) is also high, due to high temperature difference between exhaust gases and the HP. On the contrary, under low HP temperatures the condenser power capacity will be low: according to eq. (26), a low  $\Delta T$  between HP and coolant will mean low power, for a given thermal resistance. Therefore, there will be excess boiling power not absorbed by the condenser blocks. This excess will only be absorbed by the auxiliary cooling cup (a concentric tube heat exchanger) located above the condenser blocks, as seen in Figure 5. Therefore, at low HP

temperatures the condenser power capacity will be the lowest of the two, being the limiting factor for the total thermal power.

At high HP temperatures the opposite occurs, with the condenser power capacity being high and the evaporator power being low. So, at high temperatures the condenser load, according to eq. (28), will not be 100% and therefore the thermal power, voltage and electric power will only be a fraction of the condenser power capacity. Therefore, the predicted evaporator-condenser total thermal power envelope is well in line with the measurements and inclusively helps to better understand them.

The optimal HP temperature is found to be somewhere around 150°C. Below 150°C more modules are active (higher available energy) but with less output capacity (low  $\Delta T$ , Seebeck voltage). Above 150°C the active modules have higher output capacity (high  $\Delta T$ , high Seebeck voltage) but less thermal energy is available, so only a few of them will be operating. Of course, if higher thermal powers or evaporator efficiencies would be available, then the evaporator power would not fall so steeply and therefore the optimum HP temperature would be higher.

The Open Circuit Voltage and Electric Power plots, represented in Figure 14 and 15 reflect what has been said concerning thermal power. These figures present both experiments and predictions. The predictions are within a small error range, with the differences in electric power being mainly attributed to the uncertainties in the internal resistance calculation from the open and closed circuit voltages, due to differences between thermoelectric modules. The “predicted total voltage/power condenser maximum” curve is the theoretical limit for this 12 module system if the evaporator power would not be limited. If additional modules would be added to the system, then the whole condenser curve would be located further up. This results in an increase of power at low HP temperatures, but output power at high HP temperatures is maintained, due to the evaporator limits.



## Conclusions

A detailed 1D model for assessing the performance of a thermoelectric generator with Heat Pipe heat exchangers has been proposed and validated with the experimental results of a proof-of-concept model. This model incorporated all major thermal and electric factors affecting Thermoelectric Module behaviour into a 1D approach, including thermal and electric contact resistances, as well as diffuse and localized (interfacial) heat sources and sinks due to Peltier/Joule effect.

The use of heap Pipes was found to have significant advantages in terms of providing constant operating temperature, passive protection against overheating and temperature downgrading without the need for heat rejection mechanisms and providing a cascading operation without temperature dilution.

At low HP temperatures the condenser output capacity was found to be the limiting factor for maximizing output. At high HP temperatures the limiting factor was found to be the evaporator power. So, high temperature output may be improved by increasing evaporator efficiency or by increasing the exhaust power. The tuning of the operating temperature of the HP was found to be vital to maximize output.

Illustrative tests were made with a proof of concept prototype with 12 mass market Bismuth Telluride modules attached to a small Diesel engine with low exhaust temperature. The thermal performance achieved with this concept opens a good prospect for future scaled-up prototypes working at higher temperatures with higher available exhaust thermal powers and using novel, higher Figure-of-Merit modules.

## Acknowledgements

Project ThinHarvest (FCOMP-01-0124-FEDER-041343 / EXPL/EMS-ENE/1023/2013) and Post doctoral grant SFRH/BPD/89553/2012, financed by FEDER funds through Programa Operacional Fatores de Competitividade – COMPETE and National funds through PIDDAC and FCT – Fundação para a Ciência e a Tecnologia;

Luso-American Foundation / National Science Foundation (FLAD/NSF) 2013 PORTUGAL – U.S. Research Networks Program, Project “Waste Exhaust Energy Recovery of Internal Combustion Engines”;

## References

- [1] Atabania A.E., Badruddina I.A., Mekhilefc S., Silitonga A.S. “A review on global fuel economy standards, labels and technologies in the transportation sector”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 15 (2011) 4586– 4610, 2011
- [2] Ribeiro, B. and Martins, J., “Direct Comparison of an Engine Working under Otto, Miller and Diesel cycles: Thermodynamic Analysis and Real Engine Performance”, *SAE Technical Paper* 2007-01-0261, 2007.
- [3] Martins, J. J.G., Uzuneanu, K., Ribeiro, B. and Jasansky, O., "Thermodynamic Analysis of an Over-Expanded Engine", *SAE Technical Paper* 2004-01-0617, included in 'Modeling of Spark Ignition Engines', edited by SAE (ISBN Number: 0-7680-1366-6), 2004.
- [4] Pinto J., Costa T., Martins J., Brito F. P., “Hypo-Cycloidal Crank Mechanism to Produce an Over-Expanded Cycle Engine”, in “New Trends in Mechanism and Machine Science: From Fundamentals to Industrial Applications”, SPRINGER, pp 221-232, ISBN 978-3-319-09410-6, 2014
- [5] Mori, M., Yamagami, T., Sorazawa, M., Miyabe et al., “Simulation of Fuel Economy Effectiveness of Exhaust Heat Recovery System Using Thermoelectric Generator in a Series Hybrid”, *SAE Technical paper* 2011-01-1335.
- [6] Martins, J. and Brito F.P., "Carros Elétricos", Dec. 2011, Porto, Portugal: PubliIndústria.

- [7] Martins, J., “Motores de Combustão Interna”, 4th edition (revised and extended, in Portuguese), Publindustria, Porto, Portugal, ISBN: 978-989-723-033-2, 2013.
- [8] Heywood, J., Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw Hill, 1988.
- [9] Ribau J., Silva C., Brito F.P., Martins J., “Analysis of Four-Stroke, Wankel and Microturbine-Based Range Extenders for Electric Vehicles”, Energy Conversion and Management, Elsevier, 58 (2012) 120–133
- [10] Bell, L., “Cooling, heating, generating power, and recovering waste heat with thermoelectric systems”, Science, 321, pp. 1457-1461, 2008.
- [11] D.M. Rowe, G. Min, Design theory of thermoelectric modules for electrical power generation, Science, Measurement and Technology, IEEE Proceedings, 143, 351, (1996)
- [12] Hung, T. C., Shai, T. Y. and Wang S. K. “A review of organic rankine cycles (ORCs) for the recovery of low-grade waste heat”, Energy, Elsevier, 22-7, pp. 661-667, 1997.
- [13] P. Pichanusakorn, P. Bandaru, Nanostructured thermoelectrics, Mater. Sci. Eng. R 67, 19 (2010) 19–63
- [14] Vining, C.B. “An inconvenient truth about thermoelectrics”, Nature Materials, 8, February 2009.
- [15] Min, G. and Rowe, D. M., "Conversion Efficiency of Thermoelectric Combustion Systems", IEEE Transactions on Energy Conversion, 22- 2, June, 2007.
- [16] J. P. Carmo, Joaquim Antunes, M. F. Silva, J. F. Ribeiro, L. M. Goncalves, J. H. Correia, "Characterization of thermoelectric generators by measuring the load-dependence behavior", Measurement, Vol. 44, pp. 2194-2199, 2011.
- [17] Yang J., Stabler F.R., “Automotive Applications of Thermoelectric Materials”, Journal of Electronic Materials, July 2009, Volume 38, Issue 7, pp 1245-1251
- [18] J. P. Carmo, L. M. Goncalves, R. F. Wolffenbuttel, J. H. Correia, "A planar thermoelectric power generator for integration in wearable microsystems", Sensors and Actuators A, Vol. 161, pp. 199-204, 2010.
- [19] Dresselhaus, M.S., Chen, G., Tang, M.Y., Yang, R.G., et al., “New Directions for Low-Dimensional Thermoelectric Materials”. Adv. Mater., 19 (2007): 1043–1053. doi: 10.1002/adma.200600527

- [20] F. P. Brito, Jorge Martins, L.M. Goncalves, Nuno Antunes, Diogo Sousa, Influence of Heat Pipe Operating Temperature on Exhaust Heat Thermoelectric Generation, SAE International Journal of Passenger Cars - Mechanical Systems 6(2):2013 652-664, DOI: 10.4271/2013-01-0559
- [21] F. P. Brito, Jorge Martins, Rui Sousa, L.M. Gonçalves, Temperature controlled Exhaust Heat Thermoelectric Generation, SAE International Journal of Passenger Cars - Electronic and Electrical Systems 561-571, 5(2):2012. DOI 10.4271/2012-01-1214
- [22] Reay D., Kew P. "Heat Pipes: Theory, Design and Applications", Chapter: Variable Conductance Heat Pipes, p 215-218; Chapter: Theoretical background: Heat transfer in the condenser, p. 81; Chapter: Heat transfer and fluid flow theory, p. 66, 67, Butterworth-Heinemann, Elsevier, 5th ed. 2006, ISBN 978-0-7506-6754-8
- [23] Martins, J., Brito, F.P., Goncalves, L.M., Antunes, J., "Thermoelectric Exhaust Energy Recovery with Temperature Control through Heat Pipes", SAE Technical Paper 2011-01-0315, 2011
- [24] Brito, F.P., Martins, J., Goncalves, L.M., Sousa, R., "Modelling of Thermoelectric Generator with Heat Pipe Assist for Range Extender Application", 37th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society (IECON 2011), November 7-10th, Melbourne, Australia, 2011
- [25] Zukauskas, A., "Heat Transfer from Tubes in Cross Flow," in J. P. Hartnett and T. F. Irvine, Jr., Eds., Advances in HeatTransfer, Vol. 8, Academic Press, New York, 1972
- [26] Incropera F.P., deWitt D.P., "Fundamentals of Heat and Mass Transfer", Chapter 1 – Introduction, p. 4; Chapter 3.5 – Conduction with Thermal Energy Generation, p. 108-110; Chapter 3.6 Heat Transfer from extended surfaces, p. 133; Chapter 4.3.3: The Conduction Shape Factor, p. 180; Chapter 8.4.2 – The entry region, p. 494,495; 3rd Ed., Wiley, 1990.
- [27] B. Snaith, P.W. O'Callaghan, S.D. Probert, Interstitial materials for controlling thermal conductances across pressed metallic contacts, Applied Energy, Volume 16, Issue 3, 1984, Pages 175-191
- [28] Peterson, G. P., and L. S. Fletcher, "Thermal Contact Resistance of Silicon Chip Bonding Materials," Proceedings of the International Symposium on Cooling Technology for Electronic Equipment, Honolulu, 1987, pp. 438–448.

- [29] Yovanovich, M. M., "Recent Developments in Thermal Contact, Gap and Joint Conductance Theories and Experiment," in C. L. Tien, V. P. Carey, and J. K. Ferrel, Eds., Heat Transfer — 1986 , Vol. 1, Hemisphere, New York, 1986, pp. 35–45.
- [30] Fried, E., "Thermal Conduction Contribution to Heat Transfer at Contacts," in R. P. Tye, Ed., Thermal Conductivity, Vol. 2, Academic Press, London, 1969.
- [31] Rowe D.M., "General Principles and Basic Considerations", in Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano", pp. 1-1 – 1-14, CRC Press, ISBN 9780849322648, 2005

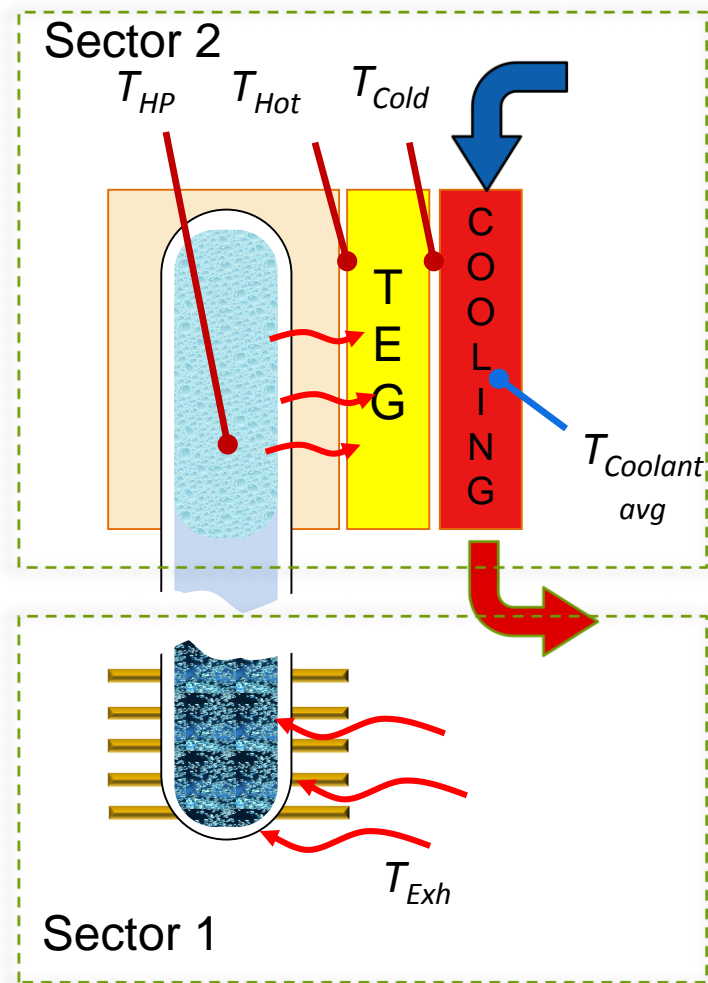


Figure 1 – Outline of the operation of a Heat Pipe Heat Exchanger

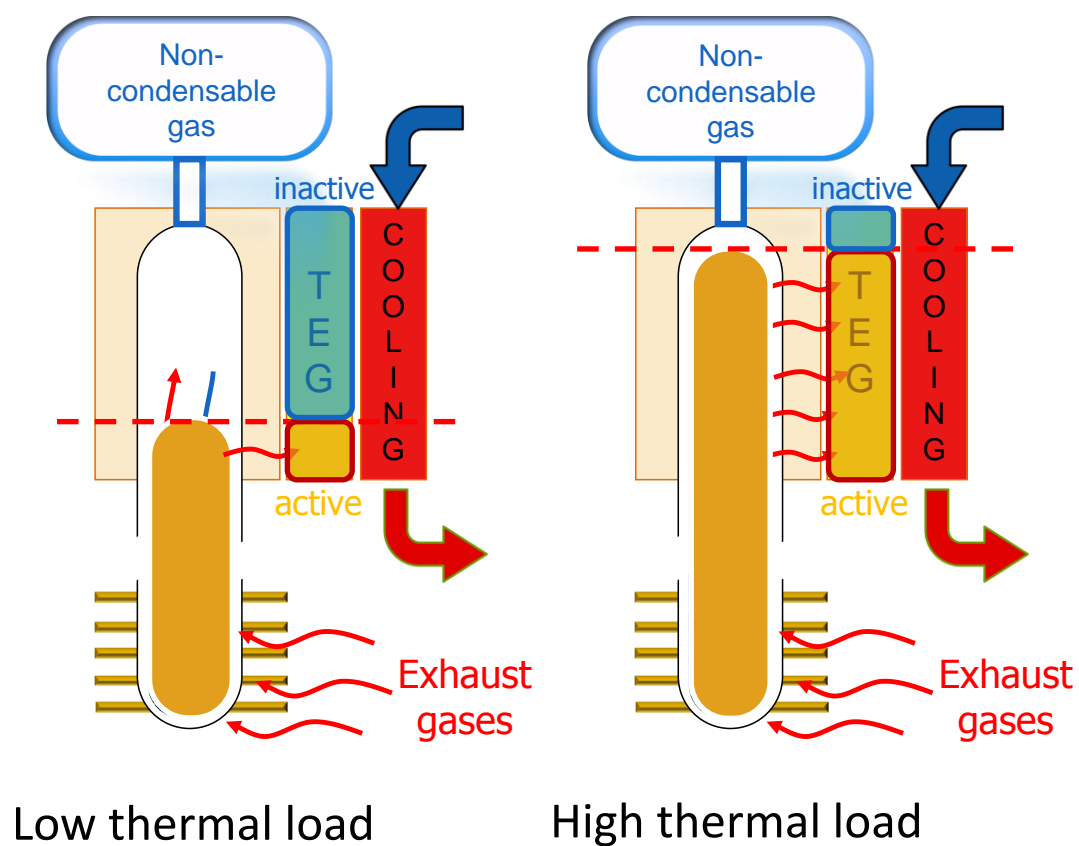


Figure 2 - Outline of the operation of a Variable Conductance Heat Pipe Heat Exchanger under variable load

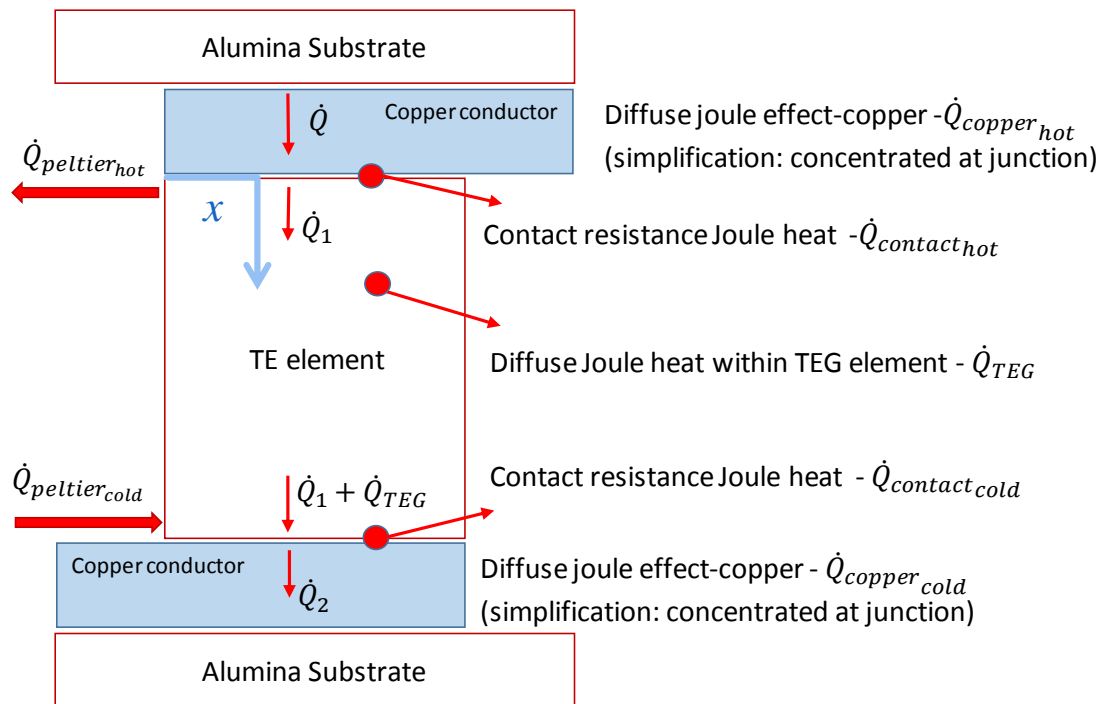


Figure 3 – Outline of the heat fluxes sources and sinks within a Thermoelectric Element



Figure 4 – Engine used (10 hp Yanmar L100N Diesel DI)



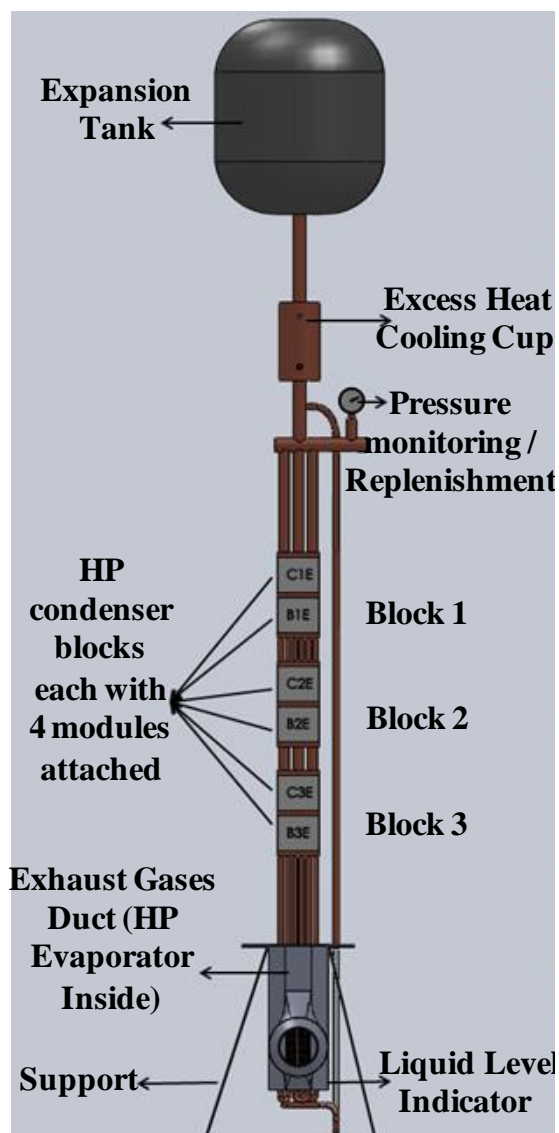


Figure 5 – Outline of the Proof-of-Concept Heat Pipe-based Thermoelectric generator

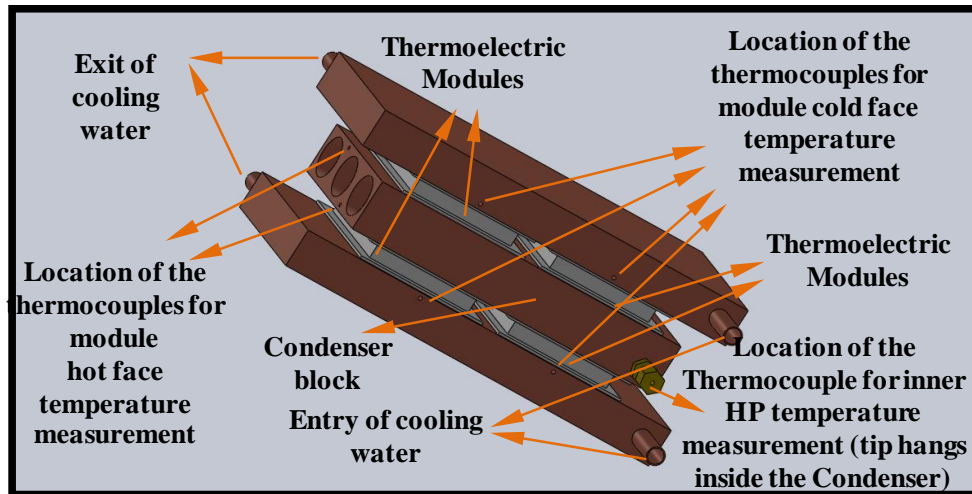


Figure 6 – One of the three HP condenser blocks each one attached with modules on both sides and external cooling ducts.

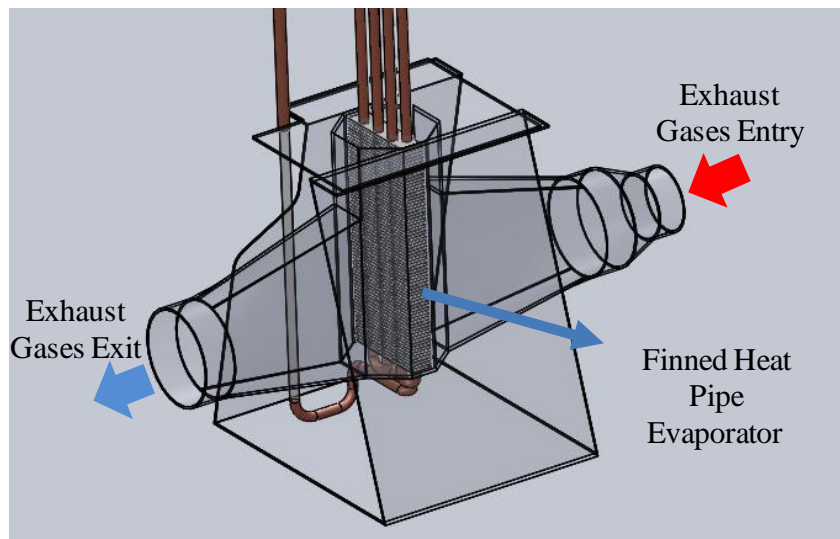


Figure 7 - Drawing of the exhaust gases duct with the finned HP Evaporator inside (6 pipes with 8mm outer diameter)

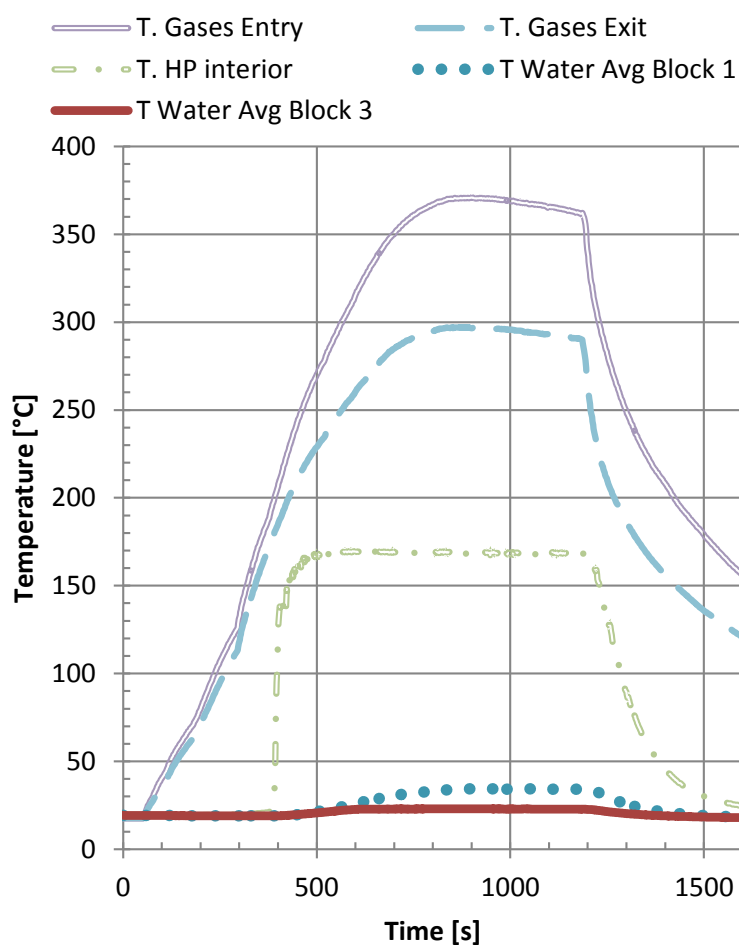


Figure 8 - Temperature results for an HP pressure / temperature of 7.8bar/168°C

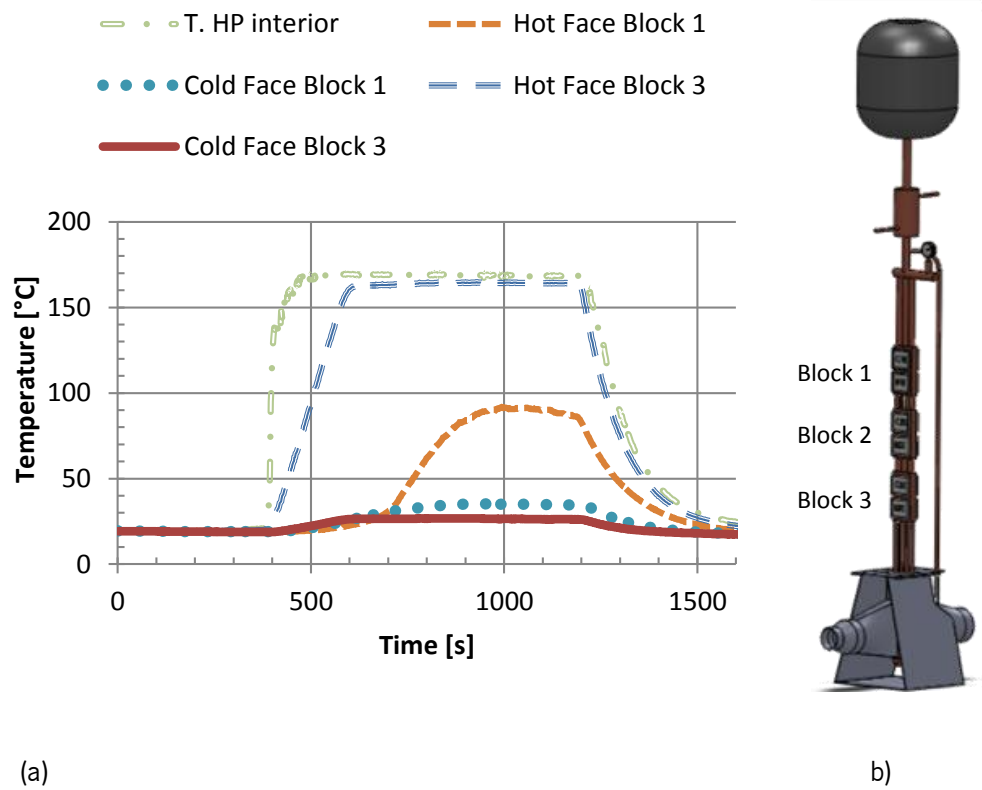


Figure 9 - Temperature results for an HP pressure / temperature of 7.8bar/168°C (a) and drawing of the prototype (b)

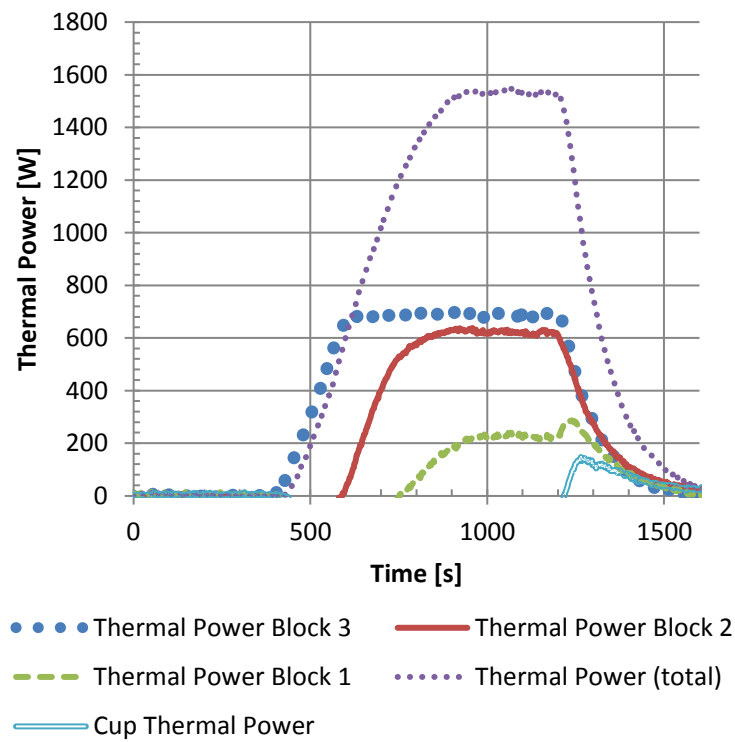


Figure 10 - Thermal power results for an HP pressure / temperature of 7.8bar/168°C

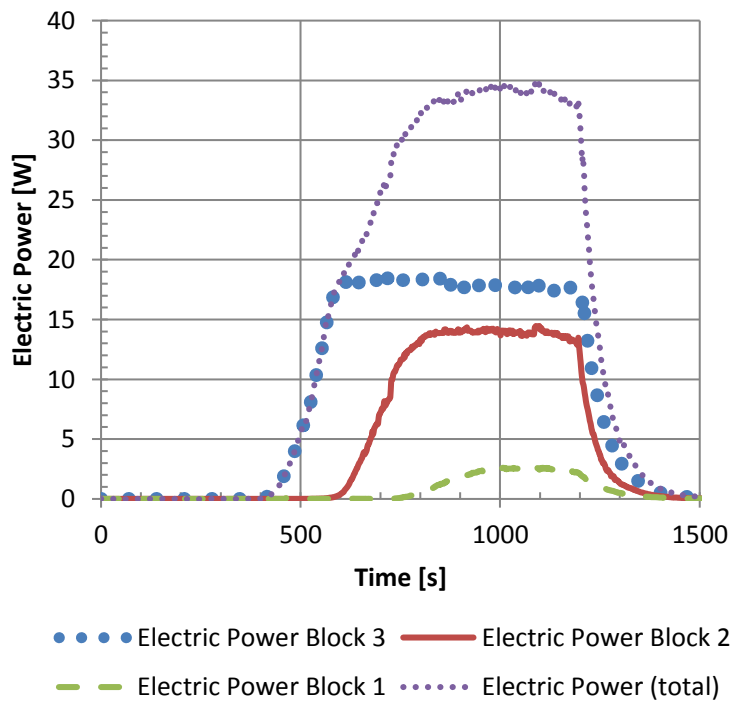


Figure 11 – Electric Power for an HP pressure / temperature of 7.8bar/168°C

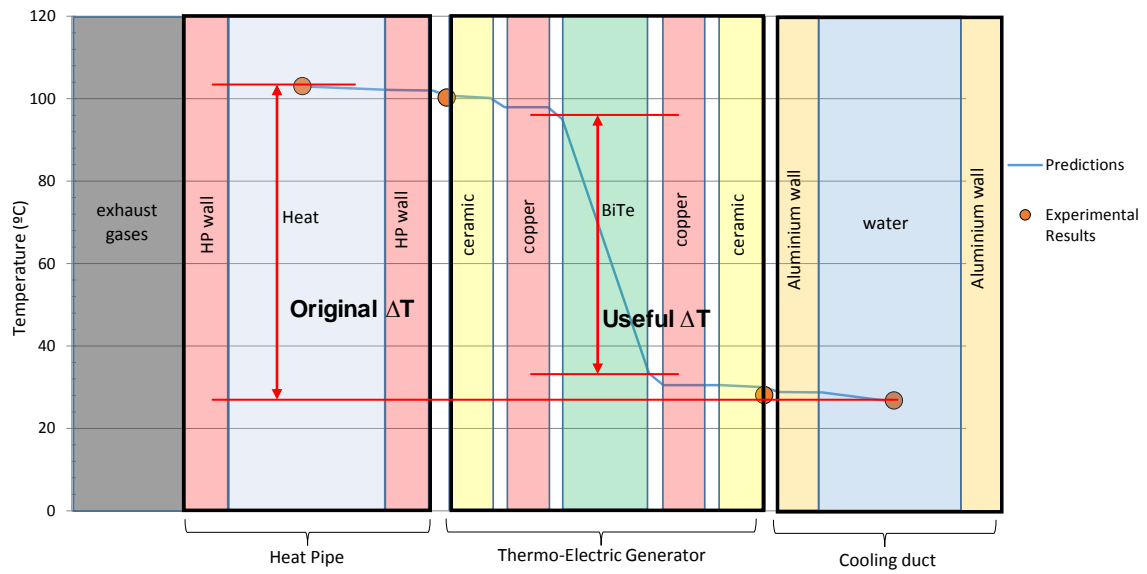


Figure 12 – Theoretical vs experimental temperature profile along Sector 2 (Condenser – TEG – water cooling ducts) HP pressure / temperature of 1.1 bar / 103 °C (white space represents temperature fade across interfaces due to thermal contact resistance).

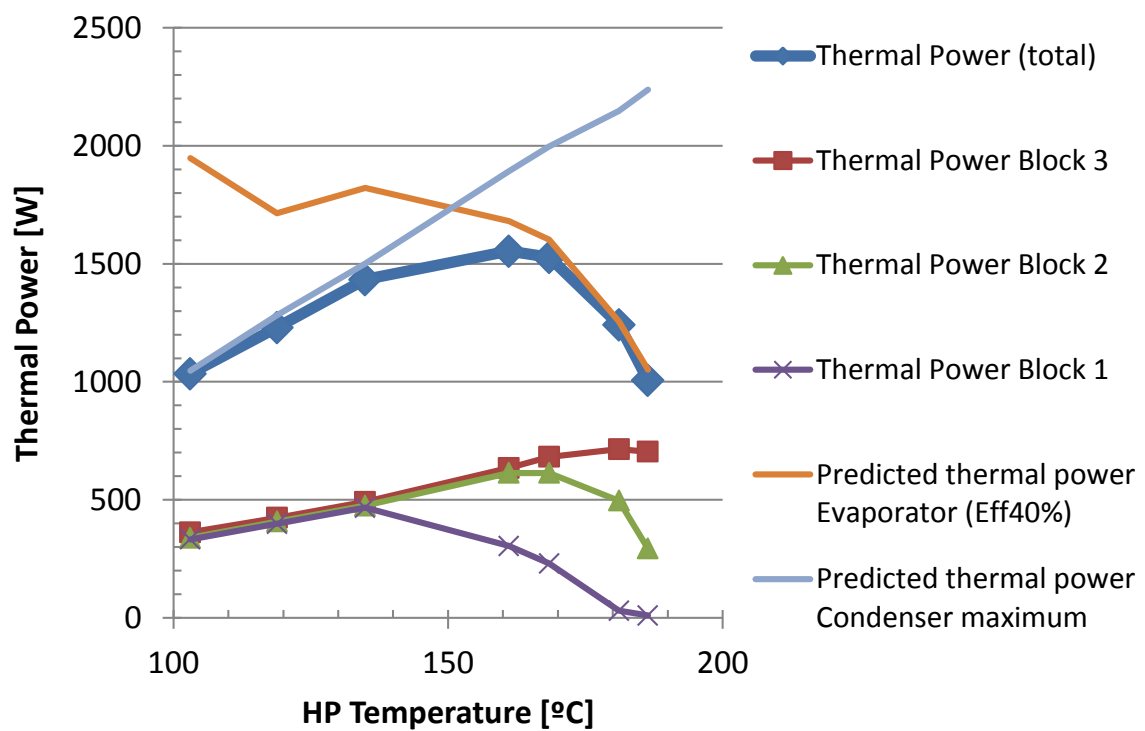


Figure 13 - Theoretical vs experimental Steady State thermal power results for the whole HP pressure / temperature range tested

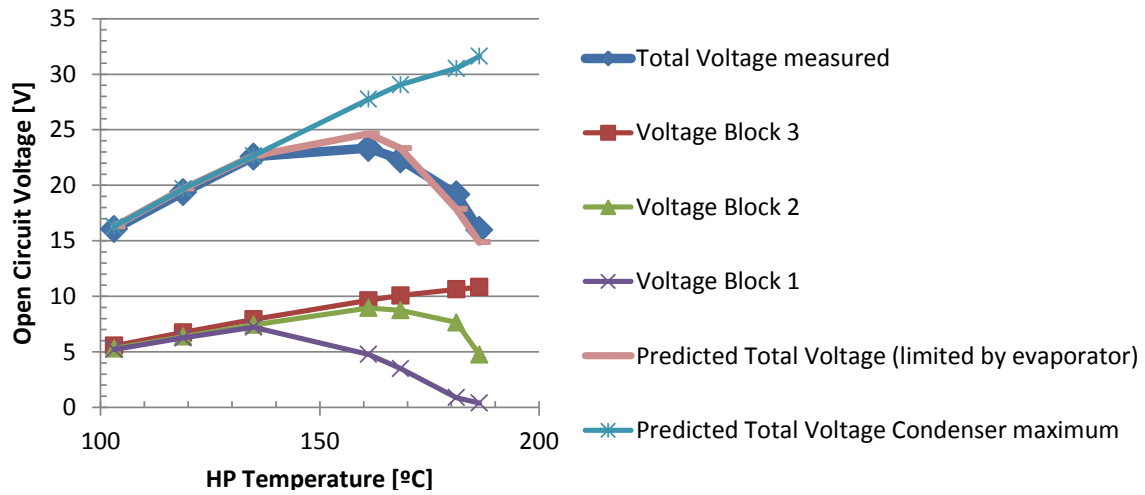


Figure 14 - Theoretical vs experimental Steady State Open Circuit Voltage results for the whole HP pressure / temperature range tested

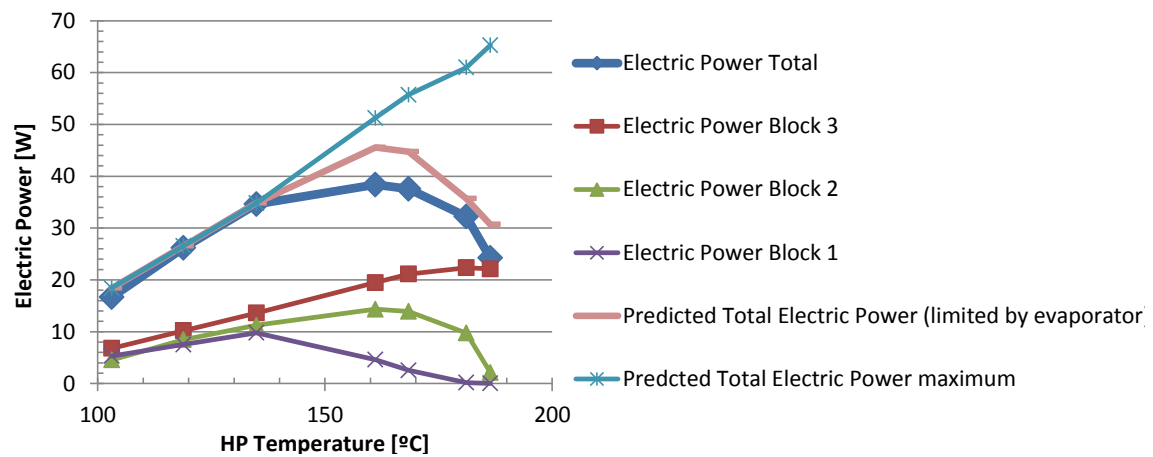


Figure 15 - Theoretical vs experimental Steady State maximum power output results for the whole HP pressure / temperature range tested